现代物理基础丛书 53

# 量子多体理论与运动模式动力学

王顺金 著

科学出版社

# 《现代物理基础丛书》编委会

现代物理基础丛书　53

# 量子多体理论与运动模式动力学

王顺金　著

科学出版社

北　京

## 内 容 简 介

本书第一篇“简明量子多体理论”，系统介绍了量子多体问题研究中常用的高等量子论的基本理论和量子多体理论的基本理论方法，包括量子力学的理论结构，量子力学与经典力学的对应关系，对称性理论和守恒定律，量子多体理论中的平均场理论及其扩充和应用，密度矩阵和格林函数等非微扰理论方法，处理碰撞、散射和反应问题的理论方法，相对论性量子力学，量子力学的积分形式与路径积分，量子力学中的几何相位等。第二篇“量子运动模式动力学”，系统介绍了作者对量子世界和量子系统基本运动模式的观点和研究成果，以及基于这一观点建立的三种量子运动模式的动力学：关联动力学、代数动力学和耦合动力学。本书的宗旨之一是促进对物理学基本问题感兴趣的读者对量子论基础的研究。为此，作者提出了一系列关于量子论基本问题的观点，以引发人们的讨论与研究。

本书强调对物理概念和原理阐述的深刻性和数学表述的简洁性，在内容和深度上适合于物理学博士研究生和高年级硕士研究生，尽可能为物理学研究生阅读专业文献和从事物理学理论研究提供必要的高等量子论和量子多体理论基础，力图在量子论学习和微观物理学研究之间架设一座桥梁。本书第一部分的内容兼顾理论物理、粒子物理与核物理、凝聚态物理和量子光学等专业研究生的需要，也可供从事物理学研究的科技人员参考。第二部分可供理论物理和量子多体理论专家、研究人员和年轻学者参考、研究和应用。

**图书在版编目（CIP）数据**

量子多体理论与运动模式动力学/王顺金著．—北京：科学出版社，2013
(现代物理基础丛书；53)
ISBN 978-7-03-036756-3

Ⅰ. ① 量…　Ⅱ. ① 王…　Ⅲ. ①量子论　Ⅳ. ①O413

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2013) 第 035248 号

责任编辑：钱　俊　鲁永芳／责任校对：何艳萍
责任印制：钱玉芬／封面设计：陈　敬

科学出版社 出版
北京东黄城根北街 16 号
邮政编码：100717
http://www.sciencep.com

骏杰印刷厂 印刷
科学出版社发行　各地新华书店经销
*
2013 年 3 月第　一　版　开本：B5(720 × 1000)
2013 年 3 月第一次印刷　印张：24 1/4
字数：460 000

**定价：98.00 元**
(如有印装质量问题，我社负责调换)

# 前　　言

四川大学出版社于 2005 年出版了《高等量子论与量子多体理论》一书, 一年两次印刷达 4500 多册。该书在四川大学、兰州大学、中国科学院近代物理研究所、西南交通大学和台湾成功大学等五校所的研究生及年轻研究人员中讲授，收到了良好的效果。清华大学、北京师范大学和中国科学院物理研究所等校所物理学方面研究生也把该书作为参考书。台湾一些书局订购了该书，建议出版繁体字版本; 另有高校老师建议出版英文版。八年来，这本书在研究生教育中发挥了作用。

鉴于上述情况，四川大学物理科学与技术学院龚敏院长和科学出版社钱俊编辑商议，建议作者修订该书，在科学出版社出版。作者响应此建议并对该书进行了长达半年的修改扩充。由于内容增补较多，结构变化很大，该书更名为《量子多体理论与运动模式动力学》。

本书第一篇“简明量子多体理论”，系统介绍量子多体问题研究中常用的高等量子论的基本理论和量子多体理论的基本理论方法, 包括量子力学的理论结构, 量子力学与经典力学的对应关系, 对称性理论和守恒定律, 量子多体理论中的平均场理论及其扩充和应用, 密度矩阵理论和格林函数理论等非微扰理论方法, 处理碰撞、散射和反应问题的理论方法, 相对论性量子力学, 量子力学的积分形式与路径积分, 量子力学中的几何相位，量子力学问题的分类等, 其中包含了作者多年的研究成果和对量子论基本问题的特有看法。本书强调对物理概念和原理阐述的深刻性和数学表述的简洁性, 在内容和深度上适合于物理学博士研究生和高年级硕士研究生, 尽可能为物理学研究生阅读专业文献和从事物理学理论研究提供必要的高等量子论和量子多体理论基础, 力图在量子论学习和微观物理学研究之间架设一座桥梁。这一部分的内容兼顾理论物理、粒子物理与核物理、凝聚态物理和量子光学等专业研究生的需要, 也可供从事物理学研究的科技人员参考。

本书第二篇“量子运动模式动力学”，系统介绍作者对量子世界和量子系统基本运动模式的观点和研究成果，以及基于这一观点建立的三种量子运动模式动力学：描述量子关联运动模式的关联动力学，描述量子对称运动模式的代数动力学和描述量子系统与环境耦合运动模式的耦合动力学。其中，第 13、14 章是基于作者及其合作者所发表的相关论文, 经修改和扩充而成，并列出比较全面的文献索引。感谢四川大学陶军博士对第 13 章电子文本转换提供的帮助。第 12、15 章是基于作者 2011 年 10 月在“第七届彭桓武理论物理论坛”上的报告, 感谢中国科学院理论物理研究所欧阳钟灿教授的邀请, 让作者有机会在这个全国著名的论坛上做报告;

还感谢中国科学院理论物理研究所周善贵教授对这两章生动而准确的表述所提供的帮助。第二篇的内容是本书所特有的, 可供理论物理和量子多体理论专家、研究人员和年轻学者参考、研究、讨论和应用。

本书的宗旨之一是促进对物理学基本问题感兴趣的读者对量子论基础的研究。为此，在量子论基本理论的阐述方面, 包含了作者长期研究和思考得来的一些观点, 如量子力学理论结构中关于 “运动学和动力学” 的观点, “量子力学对于经典力学的变革植根于运动学” 的观点, 真空的两种物理效应包括 “宏观平稳真空的相对论尺钟效应和微观涨落真空的量子效应” 的观点，把宏观物理时空看作 “真空背景场的几何” 的观点, 把相对论效应看作 “宏观平稳真空背景的尺钟效应及其共轭的运动学效应” 的观点, 真空量子涨落如何导致量子化的观点, 量子论的本质在于它包含了真空量子涨落的、近似的白噪声属性 (真空量子涨落的严格的普朗克尺度属性则表现为引力效应) 的观点，以及经典力学与量子力学的联系和区别的观点等。在对量子世界的再认识和基本量子运动模式方面，有如下一些观点：“量子世界等于量子系统加真空背景”，“量子世界的基本要素包括微观粒子、相互作用和真空背景”，“量子系统的三种基本属性包括对称性、多体关联和系统–背景耦合，它们决定了量子系统的结构和性质，导致量子系统三种基本运动模式 (关联运动模式、对称运动模式和耦合运动模式)” 等。对这些问题阐述的观点, 是作者个人的看法, 构成了本书的特色之一。希望对这一问题的研究, 能起到抛砖引玉的作用, 引发年轻人对量子论基本问题的深入思考和研究, 在物理学基本理论面临又一次变革的今天, 这会是有益的。

本书得以顺利出版, 四川大学物理科学与技术学院龚敏院长是热情的支持者和有力的推手, 而科学出版社钱俊编辑则是整个出版工作的策划者和组织者, 作者对他们表示深深的感谢，同时感谢教育部、四川大学及物理科学与技术学院出版基金的支持。

王顺金

2012 年 8 月于西南交通大学九里堤校区

# 《高等量子论与量子多体理论》前言

2000 年初, 兰州大学物理科学与技术学院为了加强全院研究生基础理论课的教学工作, 要我讲授全院研究生的必修课——高等量子力学。作为教师, 我责无旁贷地接受了这项任务。要较好地完成这项任务, 必须明确几个问题。

(1) 课程的目的与定位问题。它决定了教学大纲和教材的内容与深度, 以及教学的目的与要求。高等量子力学是一门重点综合型大学物理学研究生的基础理论课程, 在内容和深度上必须有较高的要求, 要为物理学研究生阅读专业文献和从事物理学研究提供必要的量子力学理论基础, 尽可能在量子论学习和微观物理学研究之间架设一座桥梁。此外, 它还应包含当前科研工作中最有用的新成果。

(2) 研究生听众的组成问题。必修这门课程的 80 多名研究生来自理论物理、粒子物理与核物理、凝聚态物理与材料科学, 以及量子光学等专业, 其中学习实验物理学的研究生占多数 (80%左右)。面对这一情况, 为使各专业的学生都能从课程中受益, 学到对他们有用的知识, 本课程在内容上必须兼顾这些专业, 而在教学和考试要求上又要有所区别。

(3) 与国内外教材的关系问题。目前, 国内外有许多优秀的高等量子力学教材, 但是前面两项要求决定了我必须花时间、花精力去编写一本教材, 才能达成上面确定的目标。国内外优秀的高等量子力学教材是全世界高等教育的宝贵财富, 教师对这些教材应当充分利用, 同时又要使自己编写的教材能够与之互补, 因为任何有生命力的书籍都应当是有特色、有个性的。基于上述认识, 我花了半年多的时间写出了初稿, 在兰州大学连续讲了三次, 在西南交通大学讲了两次, 2002 年, 我调往四川大学后, 又在物理科学与技术学院讲了两次, 常常出现每学期都要授课的忙碌景况。其间, 我针对讲授过程中出现的问题对教材进行了修改和补充。

2003 年, 四川大学研究生院制定了研究生基础课教材建设规划。物理科学与技术学院和物理系的领导十分关心本学院研究生基础理论课的教学工作, 多次敦促我在《高等量子论与量子多体理论》讲义的基础上, 以正式出版物的形式在四川大学出版社出版。四川大学出版社的同志也十分热情, 在他们的帮助下, 这本书得以顺利出版。

本书的撰写注意了以下几点: 强调量子论的应用, 强调教材与科研接轨, 强调基本理论问题, 强调量子论的最新进展。因为量子论的应用所涉及的问题绝大多数是量子多体问题, 因此本书用很大篇幅 (第 3~6 章) 介绍量子多体理论的基本概念和基本理论方法, 希望对读者阅读有关专业文献以及开展量子多体问题研究有所裨

益。在量子力学的基本理论的阐述方面, 本书包含了作者长期研究和思考得来的一些观点, 如量子力学理论结构中关于 "运动学和动力学" 的观点, "量子力学对于经典力学的变革植根于运动学" 的观点, 真空量子涨落如何导致量子化的观点, 把物理时空看作 "真空背景的几何" 的观点, 把相对论效应看作 "平稳真空背景的尺钟效应及其共轭的运动学效应" 的观点, 以及经典力学与量子力学的联系和本质区别的观点等。对这些问题阐述的观点是作者个人的看法, 希望对这些问题的研究能起到抛砖引玉的作用, 引发年轻人对量子论基本问题的深入思考, 这在物理学基本理论面临再一次变革的今天, 将会是有益的。本书第 1,5,10,12 等章包含了作者的一些科研成果, 第 9~11 章涉及量子力学新进展的一些方面, 其中第 11 章只给读者建议了一个学习研究的提纲, 并未展开讲述。

学习本书的读者, 要求对大学物理系本科生的量子力学有比较全面扎实的基础, 对群论特别是李群有一定的基础。具备上述条件的读者, 学习本书不应有困难。对学理论物理的学生, 还能从数学的准确度上掌握本书的基本内容。

本书力求对基本物理原理和基本理论方法的物理图像做尽可能清晰直观的讲述, 强调对原理和概念从物理层面上去理解, 对基本公式和基本方法从如何应用的角度去思考; 对必要的数学推导, 则尽可能简明扼要, 重物理原理和概念的阐述, 而不拘泥于数学细节。对学理论物理的学生, 则要求从数学表述上去准确掌握定量的物理原理, 对学实验物理的学生则建议他们注重物理原理的理解和应用, 而不要求对数学公式细节的推导。

本书也凝聚了作者的亲人、同事和学生的心血和劳动。我的妻子郭开惠始终热情、耐心地支持我的教学、科研工作, 她在繁忙的教学工作之余, 帮助我打印和校对了许多章节; 学生们对各章节提出了许多好的改进意见, 帮助绘制图表，校对全书; 四川大学研究生院、物理科学与技术学院和物理系的领导对本书的出版给予了热情的关心、帮助和支持; 四川大学出版社则热情、细致地组织了出版工作。我在此对他们表示深切的感谢。

由于作者水平有限, 书中的疏漏和不妥在所难免, 请广大读者批评指正。

王顺金<br>2004 年 8 月于四川大学望江校区

# 目　　录

## 第二篇 量子运动模式动力学

# 第一篇

# 简明量子多体理论

# 第 1 章　量子力学的理论结构

本章的目的是对大学本科所学的量子力学基本理论知识进行复习与提升，对量子力学的主要应用与近期发展做简要的介绍。本章是学习本书其余各章节的基础和向导。

## 1.1　量子动力学理论的结构

量子力学作为物理学最重要的理论体系之一, 像其他严密的科学理论体系一样, 有着严谨的理论结构 [1-3]。这一严谨而简洁的理论结构反映出物理学的微观粒子动力学理论的科学之美。透视和了解这一理论结构可以帮助我们更深刻地理解和掌握量子力学的本质与精华, 对量子力学其他内容的学习将起到纲举目张的作用。

### 1.1.1　运动学与动力学

作为微观粒子动力学理论的量子力学的基本理论构架，可分为运动学与动力学两个部分。运动学与动力学是所有科学动力学理论的普适构架。

1) 运动学

物理学中运动学的目的是解决物理系统运动状态的描述问题，它的具体任务是确定运动学变量及其代数关系。

像经典力学一样，量子系统的基本运动学变量是广义坐标 $\hat{q}_i$ 和广义动量 $\hat{p}_i$，它们之间的代数关系是 Heisenberg 代数

$$[\hat{q}_i, \hat{p}_j] = \mathrm{i}\hbar\delta_{ij} \tag{1-1a}$$

$$[\hat{q}_i, \hat{q}_j] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0 \tag{1-1b}$$

其中，$\hat{a}, \hat{b}$ 之间的对易子通常定义为

$$[\hat{a}, \hat{b}] \equiv \hat{a}\hat{b} - \hat{b}\hat{a} \tag{1-1c}$$

用对易子定义的运动学代数式 (1-1) 使得量子力学的基本运动学变量 $\{\hat{q}_i, \hat{p}_i\}$ 成为不可对易的算符 ($q$-数或 $q$-变量), 本质上不同于经典力学中可对易的基本运动学变量 $\{q_i, p_i\}$。

作为对比, 经典力学的基本运动学变量也是广义坐标 $q_i$ 与广义动量 $p_i$，但它们服从的却是 Poisson 代数

$$\{q_i, p_j\} = \delta_{ij} \tag{1-2a}$$

$$\{q_i, q_j\} = \{p_i, p_j\} = 0 \tag{1-2b}$$

Poisson 括号 $\{A, B\}$ 的定义为

$$\{A(q,p), B(q,p)\} \equiv \frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i}\frac{\partial B}{\partial p_i} \tag{1-2c}$$

用 Poisson 代数定义的运动学代数式 (1-2) 使经典力学的基本运动学变量 $\{q_i, p_i\}$ 成为普通的可对易的变量 ($c$-数或 $c$-变量)。

既然量子力学的基本运动学变量是算符，由它们组成任何物理学力学量 $\hat{O}(\hat{q}, \hat{p})$ 也自然成为算符, 它们必须作用于具体的对象上才能给出物理上可观测量的数值。量子力学的力学量算符作用的对象称为态矢 (即状态矢量)，态矢描述量子系统的状态，用可归一化的波函数 $|\psi\rangle$ 表示，代表量子态的几率幅。因为波函数包含振幅和相位两个函数, 因此波函数一般用复函数描述。所有态矢的集合构成量子态的 Hilbert 空间，力学量算符则是作用于 Hilbert 空间的算符。态叠加原理使得量子态的 Hilbert 空间成为矢量空间。量子态的 Hilbert 空间通常是无限维的函数空间, 是解析几何中的有限维矢量空间的推广。波函数常用一组量子数来标志与分类。一些量子数确定的波函数的集合有时生成一个有限维 Hilbert 子空间, 所有 Hilbert 子空间的集合生成整个 Hilbert 空间, 成为量子运动的运动学状态空间。

2) 动力学

物理学中动力学的任务是确定物理系统的运动状态如何随时间变化。具体地，就是确定基本运动学变量 $\{\hat{q}_i, \hat{p}_i\}$ 或一般物理学力学量 $\hat{O}(\hat{q}_i, \hat{p}_i)$, 或者状态波函数 $|\psi\rangle$ 随时间变化的规律。为实现这一目标，动力学要解决三个问题。

(1) 惯性律问题：其任务是确定度量物理客体惯性运动的质量 $m$。惯性描述运动的永恒性 (守恒), 是物理客体的基本属性, 是运动可被确定和度量的必要条件。没有惯性 (包括静惯性和动惯性) 的客体的运动状态是任意的、不能确定的，因而只能是虚构的而非真实的客体.

(2) 力律问题：其任务是确定使物理客体的运动发生变化的势场 $V(\vec{r}, t)$。势场描述环境与客体相互作用时的能量的时空分布 (环境对客体的影响简化为势场, 势场空间分布的梯度表现为力, 其在时间分布的梯度表现为功率)。

惯性律与力律二者确定了由客体与环境组成的系统的 Hamilton 量

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}, t) \tag{1-3}$$

它包含了由客体和环境组成的系统的全部动力学信息, 规定了系统的动力学演化。

(3) 运动方程问题：运动方程是系统的能量守恒的微分形式，它决定系统的时间演化 (即时间平移) 的规律。保持能量守恒的动力学演化 (即时间平移), 要求时间平移算子等于 $\hat{H}/\hbar$(见第 2 章)。

对力学量而言, 运动方程为 Heisenberg 方程，对基本运动学变量 —— 广义坐标与广义动量有

$$\frac{\mathrm{d}\hat{q}_i}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{q}_i, \hat{H}] \tag{1-4a}$$

$$\frac{\mathrm{d}\hat{p}_i}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{p}_i, \hat{H}] \tag{1-4b}$$

对一般力学量有

$$\frac{\mathrm{d}\hat{O}(\hat{q},\hat{p})}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{O}, \hat{H}] \tag{1-4c}$$

对量子态而言, 运动方程为 Schroedinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi \tag{1-5}$$

力学量的 Heisenberg 方程和量子态的 Schroedinger 方程是等价的，前者用力学量体现动力学演化 (Heisenberg 表象)，后者则用量子态刻画动力学演化(Schroedinger 表象)，它们给出相同的力学量平均值。

### 1.1.2　观测理论

观测理论要解决理论对象 (力学量算符 $\hat{O}$ 和波函数 $\psi$) 与实验对象 (观测量) 之间的对应问题，这是量子论所特有的。因为力学量对应于代表某种理论或实验操作的算符, 必须对状态波函数实施这种操作 (进行相应的理论或实验操作)，才能给出可观测值。

力学量对应于算符 $\hat{O}$，量子态对应于态矢 $\psi$，使得量子力学理论处理的物理量与实验上的观测量之间有一个距离，观测理论就是要回答如何从力学量算符和量子态波函数或态矢经过一定实验操作和理论运算获得实验上的观测值。其规则如下。

(1) 波函数 $\psi(\vec{r})$ 是状态的几率幅，而 $|\psi(\vec{r})|^2$ 才代表粒子在空间 $\vec{r}$ 处的几率密度。

(2) 只有力学量 $\hat{O}$ 的本征值 $O_n$ 是可观测的，一般情况，一次观测到本征值 $O_n$ 的几率为 $p_n$，多次观测给出力学量 $\hat{O}$ 的平均值为

$$\langle\psi|\hat{O}|\psi\rangle = \sum p_n O_n \tag{1-6a}$$

其中，力学的量本征方程给出其本征值 $O_n$ 和本征状态 $\psi_n$：

$$\hat{O}\psi_n = O_n\psi_n \tag{1-6b}$$

几率 $p_n$ 由波函数 $\psi(\vec{r})$ 按本征状态 $\psi_n$ 的下列展开式系数计算：

$$\psi = \sum C_n\psi_n \tag{1-6c}$$

$$p_n = |C_n|^2 \tag{1-6d}$$

以上论述仅涉及观测理论的数学描述方面。观测理论的实验方面则要复杂和深刻得多，基本上涉及以下几个基本问题：①如何在实验仪器的结构上，体现出对物理量算符 $\hat{O}$ 的测量，即如何实现实验仪器及其操作与力学量算符的对应；②在力学量算符 $\hat{O}$ 对应的实验装置上进行的实验测量中，量子态如何坍缩、转化为算符 $\hat{O}$ 的本征态并给出相应的测量本征值；③量子测量的实验过程是否能够用量子力学理论本身描述。这些基本问题成为近年来开展的量子论研究的热点，这些研究将有助于量子论的进一步发展。

### 1.1.3　自由度：运动学自由度与动力学自由度

自由度是指物理系统的运动学变量的数目, 可分为运动学自由度和动力学自由度。

运动学自由度是指系统一切运动学变量的数目, 即可能的自由度 ($d$); 动力学自由度是指在一定的几何、运动学和动力学约束条件下，系统在物理上可以实现其运动的运动学变量的数目，即可实现自由度的数目 ($d_{\rm eff}$)，有时也称有效自由度数目。显然 $d \geqslant d_{\rm eff}$。二者的差别来源于：

(1) 几何约束或物理约束 (对称性原理)，使得一部分运动学自由度在物理上不能实现，成为冻结的自由度或非物理自由度。如几何约束使得算盘珠从三维运动变为一维运动; 物理约束是对称性 (守恒定律) 约束，如引力势的特殊球对称性使得在三维空间的行星运动, 由于角动量守恒只能在平面内做二维运动。规范场的非物理自由度也是由于系统的 Lagrange 具有 (较大的) 局域对称性 (规范对称性) 所致。

(2) 量子体系的能量标度的量子阶梯性或能量标度原理，使得在较低能量的物理条件下，那些具有较高激发能的运动学自由度因得不到足够的激发能量而被冻结。这一点在物理学科学实践中是非常重要的，使得我们能对复杂的量子多体系统的低能行为作出简单的描述, 从众多运动学自由度中约化出少数相关自由度 (有效自由度)。这是物理学运动分化为层次结构 (层展性质)、出现各种等效理论的物理基础。典型例子如下。

| 分子系统： | 转动激发 | | 振动激发 | | 内部电子激发 |
|---|---|---|---|---|---|
| 能　标： | $E_{\rm rot}(<0.01{\rm eV})$ | $\ll$ | $E_{\rm vib}(<0.1{\rm eV})$ | $\ll$ | $E_{\rm electron}(1{\rm eV}\sim k{\rm eV})$ |

因而，一定能区的光子，只能激发相应的运动模式, 高能标自由度被冻结。

### 1.1.4　表象理论

表象理论是选择理论描述的标架的问题 (标架理论问题), 它是经典力学中选择坐标系的问题在量子力学中的推广。经典力学的坐标和动量是普通空间的矢量，在正交基矢 $\vec{e}_i(i=1,2,3)$ 下可表为

$$\vec{q}=\sum_i q_i\vec{e}_i,\quad \vec{p}=\sum_i p_i\vec{e}_i,\quad \langle\vec{e}_i|\vec{e}_j\rangle=\delta_{ij} \tag{1-7}$$

量子力学的态矢是 Hilbert 空间的矢量，在正交基矢 $\psi_n(n=1,2,3,\cdots)$ 下可表为

$$\psi=\sum_n C_n\psi_n \tag{1-8}$$

Hilbert 空间是无限维的函数空间，它的基矢 $\psi_n$ 通常组成数目为无限的正交完备系, 满足正交归一性条件

$$\langle\psi_n|\psi_m\rangle=\delta_{nm} \tag{1-9a}$$

和完备性条件

$$\sum_n|\psi_n\rangle\langle\psi_n|=I \tag{1-9b}$$

量子力学的力学量 $\hat{O}$ 是作用于 Hilbert 空间的算符，有三种表示。其微分表示为

$$\hat{O}=O(\hat{q},\hat{p}),\quad \hat{q},\hat{p}\text{为微分算符} \tag{1-10a}$$

矩阵表示为

$$\underline{O}=(O_{nm}),\quad O_{nm}=\langle\psi_n|\hat{O}|\psi_m\rangle \tag{1-10b}$$

Dirac 抽象表示为

$$\hat{O}=\sum_{m,n}|\psi_n\rangle O_{nm}\langle\psi_m| \tag{1-10c}$$

其中，$\{\psi_n\}$ 为任一正交完备系。

Hilbert 空间的基矢 $\{\psi_n\}$ 称为表象的基矢，如果 $\psi_n$ 是 $\hat{H}$ 的本征矢量：$\hat{H}\psi_n=E_n\psi_n$，则称 $\{\psi_n\}$ 为能量表象；若 $\psi_p$ 为动量 $\hat{\vec{p}}$ 的本征矢量：$\hat{\vec{p}}\psi_p=\vec{p}\psi_p$，则称 $\{\psi_p\}$ 为动量表象。作为表象基矢的最基本的要求是完备性，即

$$\sum_n|\psi_n\rangle\langle\psi_n|=I \tag{1-11a}$$

完备性表示任意态矢 $\psi$ 都可以按基矢 $\{\psi_n\}$ 展开

$$\psi=\sum_n C_n\psi_n \tag{1-11b}$$

通常还要求表象基矢具有正交、归一性

$$\langle\psi_n|\psi_m\rangle = \delta_{nm} \tag{1-12}$$

应当指出，完备性是表象基矢的必要条件，归一性与态矢的几率解释密切相关(在全空间态矢的总几率应归一)，而正交性只是为了方便。

正像经典力学可以选择坐标系一样，量子力学也可以选择表象。选择表象是理论描述的自由，因而带有主观的成分。选择表象的原则是它能方便地描述客观物理现象，简洁地反映其物理本质。

选定表象 $\{\psi_n\}$ 以后，任何态矢可用它展开

$$\psi = \sum_n C_n\psi_n \tag{1-13a}$$

力学量可用它表示

$$\widehat{O} = \sum |\psi_n\rangle O_{nm}\langle\psi_m| \tag{1-13b}$$

省去基矢 $\psi_n$ 之后状态可用列矢表示

$$\psi \to \underline{C} = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix} \tag{1-14a}$$

力学量可用矩阵表示

$$\underline{O} = (O_{nm}) \tag{1-14b}$$

这样，量子力学就变成矩阵力学 —— 量子力学的 Heisenberg 形式。

从一个正交归一表象基矢 $\{\psi_n\}$ 到另一个正交归一表象基矢 $\{\varphi_n\}$ 的变换是幺正变换

$$|\varphi_n\rangle = U|\psi_n\rangle = \sum_m U_{mn}|\psi_m\rangle, \quad |\psi_n\rangle = U^{-1}|\varphi_n\rangle \tag{1-15}$$

因为有正交归一性

$$\langle\varphi_n|\varphi_m\rangle = \langle\psi_n|U^+U|\psi_m\rangle = \delta_{nm} \tag{1-16a}$$

所以有幺正性

$$U^+U = I, \quad U^+ = U^{-1}(U^+ = \tilde{U}^*) \tag{1-16b}$$

在 $\{\psi_n\}$ 表象中，力学量的矩阵表示是 $\underline{O}(\psi)$；在 $\{\varphi_n\}$ 表象中，力学量的矩阵表示是 $\underline{O}(\varphi)$。从客观性原则 (物理量对一个量子态的平均值是客观的，与表象选

择无关)，可以得到力学量的两个矩阵表示之间的变换关系

$$\begin{aligned}\hat{O} &= \sum_{nm} O_{nm}(\psi)|\psi_n\rangle\langle\psi_m| = \sum_{nm} O_{nm}(\varphi)|\varphi_n\rangle\langle\varphi_m| \\ &= \sum_{nm}\sum_{kl}(U^+_{nk}O_{kl}(\psi)U_{lm})|\varphi_n\rangle\langle\varphi_m| \end{aligned} \tag{1-17}$$

即

$$\underline{O}(\varphi) = U^+\underline{O}(\psi)U \tag{1-18}$$

除了离散的正交完备系之外，还有连续的正交完备系，如动量表象 $\psi_p$，其正交归一化为 Dirac $\delta$-函数

$$\langle\psi_p|\psi_{p'}\rangle = \delta(\vec{p}-\vec{p}\,') \tag{1-19a}$$

完备性条件为

$$\frac{1}{(2\pi)^3}\int \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{p}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')}\mathrm{d}^3\vec{p} = \delta(\vec{r}-\vec{r}\,') \tag{1-19b}$$

有时用离散和完备的斜交系更为方便，这时需引进双正交系 $\{\psi^i,\varphi_i\}$，它们满足

$$\langle\psi^i|\varphi_j\rangle = \langle\varphi_j|\psi^i\rangle = \delta_{ij} \tag{1-20a}$$

但

$$\langle\psi^i|\psi^j\rangle \neq \delta_{ij}, \quad \langle\varphi_i|\varphi_j\rangle \neq \delta_{ij} \tag{1-20b}$$

态矢可按斜交系展开

$$\psi = \sum_i C_i\psi^i = \sum_i C^i\varphi_i \tag{1-21a}$$

其系数一个为逆变矢量 $\{C^i\}$，一个为协变矢量 $\{C_i\}$，满足

$$\langle\psi|\psi\rangle = \sum_i C_iC^i = 1 \tag{1-21b}$$

斜交系有时是过完备的 (基矢个数大于空间维数)，如相干态表象 $\{|\alpha\rangle\}$，它们的基矢是连续编号的、斜交的、过完备的。对正交系, 双正交系退化为正交系, 协变矢量和逆变矢量退化为同一矢量。

如上所述，量子力学中力学量对应于算符, 可以把力学量算符的几种表示总结如下。

(1) 微分表示：属于连续变量表示, 如动量、能量和角动量算符, 可用空间和时间坐标的微分表示出来 (既可以在坐标表象中作出坐标微分表示, 也可以在其共轭的动量表象中作出动量微分表示)。相干态表示及其推广 (广义相干态表示) 属于连续变量表示。

(2) Dirac 表示：这是基于态矢 bra$\langle\psi|$ 和 ket$|\psi\rangle$ 符号的抽象表示, 如式 (1-13b)。

(3) 矩阵表示：属于离散表示，在 Dirac 表示中, 省去态矢, 就得矩阵表示, 如式 (1-14b)。

微分表示和 Dirac 表示适用于量子态的整个无限维 Hilbert 全空间, 而矩阵表示一般用于有限维 Hilbert 子空间。

## 1.2　量子力学几种形式及其与经典力学几种形式的对应

量子力学是在经典力学的基础上发展起来的，对应原理在量子力学的发展中起着十分重要的作用。像经典力学有几种理论形式一样，量子力学也有几种理论形式，它们与经典力学相应的理论形式有着深刻的对应关系 [4-10]。

### 1.2.1　Heisenberg-Dirac 形式与 Poisson-Hamilton 形式的对应

从表 1-1 可以清楚地看出这种对应。

**表 1-1　Heisenberg-Dirac 形式与 Poisson-Hamilton 形式的对应关系**

| | 量子力学的 Heisenberg-Dirac 形式 | 经典力学的 Poisson-Hamilton 形式 | |
|---|---|---|---|
| 运动学 | $(\hat{q}_i,\hat{p}_j)$，$[\hat{q}_i,\hat{p}_j]=\mathrm{i}\hbar\delta_{ij}$ | $(q_i,p_j)$，$\{q_i,p_j\}=\delta_{ij}$ | (1-22a) |
| 动力学 | $H(\hat{q},\hat{p})$ | $H(q,p)$ | (1-22b) |
| | $\dfrac{\mathrm{d}\hat{q}_i}{\mathrm{d}t}=\dfrac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{q}_i,\hat{H}]$ | $\dot{q}_i=\{q_i,H\}$ | (1-22c) |
| | $\dfrac{\mathrm{d}\hat{p}_i}{\mathrm{d}t}=\dfrac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{p}_i,\hat{H}]$ | $\dot{p}_i=\{p_i,H\}$ | (1-22d) |

其中，Poisson 括号定义为

$$\{X(q,p),Y(q,p)\}=\frac{\partial X}{\partial q_i}\frac{\partial Y}{\partial p_i}-\frac{\partial X}{\partial p_i}\frac{\partial Y}{\partial q_i} \tag{1-22e}$$

重复指标应求和。显然，上述对应可以归结为从 Poisson 括号向 Heisenberg 对易子的过渡

$$\{X,Y\}\rightarrow\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{X},\hat{Y}] \tag{1-22f}$$

在这一过渡中引进了量子物理基本常数 ——Planck 常量 $\hbar$, 是量子力学的本质所在。由此可见，量子力学不同于经典力学的本质植根于运动学 (是运动学的变革)，正像相对论力学不同于非相对论力学的本质植根于时空观 (是时空观的变革) 一样。

上述对应是 Heisenberg 建立矩阵力学的推动力。

### 1.2.2 Schroedinger 形式与 Hamilton-Jacobi 形式的对应

这一对应见表 1-2。

**表 1-2 Schroedinger 形式与 Hamilton-Jacobi 形式的对应关系**

| | Shroedinger 量子力学 | Hamilton-Jacobi 经典力学 | |
|---|---|---|---|
| Schroedinger 方程 | $\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi$ | 经典力学无波函, 故无对应 | (1-23a) |
| 变换式 | $\psi=R\mathrm{e}^{\mathrm{i}S/\hbar}$ | 经典力学无波函, 故无对应 | (1-23b) |
| 几率密度函数的连续性方程 | $\dfrac{\partial\rho}{\partial t}+\vec{\nabla}\cdot\vec{j}=0$ | $\dfrac{\partial\rho}{\partial t}+\vec{\nabla}\cdot\vec{j}=0$ | (1-24a) |
| 相位函数的方程 | $\dfrac{\partial S}{\partial t}+\dfrac{1}{2m}(\vec{\nabla}S)^2+V-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\nabla^2 R}{R}=0$ | $\dfrac{\partial S}{\partial t}+\dfrac{1}{2m}(\vec{\nabla}S)^2+V=0$ | (1-24b) |

其中

$$\rho=R^2,\quad \vec{j}=\frac{R^2}{m}\vec{\nabla}S,\quad \vec{p}=\vec{\nabla}S=m\dot{\vec{r}}(t) \tag{1-24c}$$

表 1-2 的这种对应是 Schroedinger 发现波动力学的基本思路。Hamilton-Jacobi 力学是经典粒子系综的力学, 当系综密度 $\rho(\vec{r},t)=\delta(\vec{r}-\vec{r}(t))$ 时, 其一阶矩方程就过渡到一个粒子的经典力学方程。Hamilton-Jacobi 力学的创新在于通过粒子系综把粒子力学与波动力学联系起来, 它引进了粒子运动的等相位的波阵面函数 —— Hamilton-Jacobi 函数 $S(\vec{r},t)$，粒子动量是 $S(\vec{r},t)$ 的梯度, 从而把粒子运动的波阵面与几何光学中光子运动的波阵面对应起来, 因而量子力学的 Schroedinger 形式也建立起与光学的对应。式 (1-24b) 中的量子力学方程的第四项称量子势，当它为零时 ($\hbar\to 0$)，量子力学方程就过渡到经典力学方程。在经典力学中, 具有确定轨道的粒子的运动所对应的密度分布是 $\delta$- 函数 $\rho(\vec{r},t)=\delta(\vec{r}-\vec{r}(t))$, 粒子以百分之百的概率 (决定论概率) 在时空中沿一条确定的轨道运动。量子涨落的随机性破坏了这种决定论运动, 使粒子的量子轨道弥散开来, 把决定论的经典轨道提升为随机性的量子波函数; 当 $\hbar\to 0$ 时, 量子涨落的弥散效应消失, 量子随机运动 (波函数) 就退化为经典决定论运动 (轨道)。

### 1.2.3 Feynman 形式与 Lagrangian 形式的对应

其对应见表 1-3。

Feynman 形式的核心在于用路径积分计算量子力学的传播子 (或 Green 函数，它包含了量子运动的全部信息，见第 5、8 章)：把每一个可能的粒子轨道与一列波的相位联系起来, 在运用与粒子轨道相联系的作用量 $S$ 计算这列波的相位时引进了量子物理常数 $\hbar$, 并考虑所有轨道对应的波的系列的等权重叠加贡献。计算中除

$\hbar$ 外用到的都是经典量，经典运动 (由于不考虑真空量子涨落) 仅对应于一条稳定的能量守恒的轨道 ($\delta S=0$ 的轨道既稳定又保证能量守恒), 真空量子涨落提供的极大的涨落能量使得一切轨道的贡献成为可能, 把一条决定论的经典轨道相位波扩散开来变成随机的量子几率幅分布 (波函数)。因此, Feynman 通过计算传播子, 提出了一种崭新的对所有轨道相位波的贡献求和的量子化方案, 用积分的形式而不是微分的形式来包括量子涨落效应, 从而实现运动学层次上的量子化。他用的都是经典物理量，这就避免了使用力学量算符。总之, 微分形式的正则量子化是考虑了真空量子涨落的局域运动学效应, 而积分形式的路径积分量子化则是考虑了真空量子涨落的整体运动学效应。因此, Feynman 路径积分形式从粒子轨道波的角度揭示了由真空量子涨落导致的量子运动的随机性。

**表 1-3 Feynman 形式与 Lagrangian 形式的对应关系**

| | 量子力学 Feynman 形式 | 经典力学 Lagrangian 形式 | |
|---|---|---|---|
| 作用量为 | $S=\int L(q,\dot{q})\mathrm{d}t,$ | $S=\int L(q,\dot{q})\mathrm{d}t$ | (1-25a) |
| 粒子量子运动的传播子包括所有轨道的贡献，而粒子沿经典轨道的运动由作用量最小决定 | $K(q',t';q,t)=\sum\limits_{\text{path}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}S[q'(t');q(t)]/\hbar}$ | $\delta S=0$ | (1-25b) |
| 由此得波函数的演化方程和经典轨道的演化方程 | $\psi(q,t)=\int K(q,t;q't')\psi(q',t')\mathrm{d}q'$ | $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\dfrac{\partial L}{\partial\dot{q}_i}-\dfrac{\partial L}{\partial q}=0$ | (1-25c) |

这种对应使 Feynman 发展了完整的量子力学的路径积分形式，发现了量子力学与 Lagrangian 经典力学的深刻联系。由于 Lagrangian 力学与场论在形式上是相似的，Feynman 路径积分形式特别适合于场的量子化 (量子场论特别是规范场量子化)。

### 1.2.4 Nelson 的随机形式与 Newton 力学 Langevin 形式的对应

对应见表 1-4。

从而建立起与 Newton 力学 Langevin 形式的对应, 其中 $\xi(t)$ 为随机力，而随机速度和平均速度定义为

**表 1-4　Nelson 的随机形式与 Newton 力学 Langevin 形式的对应关系**

| | 量子力学的 Nelson 随机形式 | 经典力学的 Newton 力学形式 | |
|---|---|---|---|
| Schroedinger 方程 | $\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi$ | 经典力学无波函, 故无对应 | (1-26a) |
| 经变换 | $\psi=\mathrm{e}^{R+\mathrm{i}S/\hbar}$ | 经典力学无波函, 故无对应 | (1-26b) |
| 可得随机速度 $\vec{u}$ 和平均速度 $\vec{v}$ 的方程 | $\frac{\partial\vec{u}}{\partial t}=-\frac{\hbar}{2m}\nabla^2\vec{v}-\vec{\nabla}(\vec{v}\cdot\vec{u})$ | | |
| 与 Newton 方程和 Langevin 方程对应 | $\frac{\partial\vec{v}}{\partial t}=-\frac{1}{m}\vec{\nabla}V+\frac{\hbar}{2m}\nabla^2\vec{u}-(\vec{v}\cdot\vec{\nabla})\vec{v}+(\vec{u}\cdot\vec{\nabla})\vec{u}$ | $\frac{\partial\vec{v}}{\partial t}=-\frac{1}{m}\vec{\nabla}V(\text{Newton})$ | (1-26c) |
| | | $\frac{\partial\vec{v}}{\partial t}=-\frac{1}{m}\vec{\nabla}V+\xi(t)(\text{Langevin})$ | (1-26d) |

随机速度

$$\vec{u}(\vec{r},t)=\frac{\hbar}{m}\vec{\nabla}R \tag{1-26e}$$

平均速度

$$\vec{v}(\vec{r},t)=\frac{\hbar}{m}\vec{\nabla}S \tag{1-26f}$$

Nelson 从无摩擦量子 Brown 运动的假定出发，运用随机过程理论导出了与 Schroedinger 方程等价的上述方程，在粒子坐标和速度的层次上揭示了量子运动的随机本质，促进了后来场论的随机量子化理论的发展。应当指出, Langevin 方程由于包含的是经典的实的随机力, 由它导出的是经典统计分布函数的 Fokker-Planck 方程, 而非量子力学 Schroedinger 方程。

## 1.3　量子力学的主要应用

量子力学自 1925 年诞生以来, 已度过了 80 多年辉煌的历程。量子力学理论向场论的自然延伸和纵深发展，产生了量子场论和基本粒子理论。量子力学在横向的发展与应用，在原子、分子物理、原子核物理、凝聚态物理以及量子光学等方面产生了极其丰硕的成果。

在原子、分子物理学中的应用，主要是发展了原子的壳层模型和组态相互作用理论，研究了原子、分子的电子结构与光谱线问题，在此基础上处理原子、分子碰撞问题，为团簇物理, 量子化学和量子生物学奠定了理论基础。

在原子核物理中的应用，发展了核子–核子强相互作用的核力理论，原子核结构的壳层模型、集体运动模型和组态混合模型，以及各种核反应理论和核衰变理论。

在凝聚态物理中的应用主要是发展了固体的能带理论和从头算理论, 以及以此为基础的各种模型理论，如 Heisenberg 模型、Anderson 模型、Hubbard 模型, 超导体电性的 BCS 理论及其扩展和密度矩阵重整化理论。

量子力学也成功地用于处理电磁辐射场 (光子) 与原子、分子的相互作用，发展了量子光学的各种模型理论，如腔场量子电动力学中的 Jaynes-Cummings 模型。

量子力学与信息论相结合, 产生量子信息理论, 为量子计算和量子通信奠定了理论基础。

上述内容将结合量子力学的主要理论方法和理论概念的阐述, 在以下各章中予以简要介绍。

## 1.4　量子力学的近期发展

量子力学在物理学各个分支的成功应用，其理论概念和理论方法也得到发展 [11,12]。其中最重要的发展有量子多体理论，动力学对称性理论，非自治系统量子力学，量子力学的几何相位和拓扑量子力学，宏观量子力学理论，量子信息、量子通信与量子计算机等。下面选择几个方面进行介绍。

量子多体理论的概念与方法，主要包括平均场与剩余相互作用理论，二次量子化理论，密度矩阵与 Green 函数理论，多体关联与集团展开理论，以及量子统计所需的理论方法。这些进展构成了第 $3\sim6$ 章的主要内容, 而相互作用导致的量子关联运动模式及其动力学, 将在第二篇第 13 章中以“量子关联运动模式和关联动力学”的标题予以系统介绍。

动力学对称性理论是一般对称性理论的发展与延伸，根据系统 Hamilton 量的代数结构去研究系统的特殊的与相互作用相联系的对称性以及相应的运动模式、守恒定律和量子数。动力学对称性理论在粒子物理、原子核物理、原子分子物理、量子光学以及凝聚态物理中都有成功的应用。第 2 章将系统介绍这一深刻而美丽的理论, 而物理对称性导致的量子对称运动模式及其动力学, 将在第二篇第 14 章结合非自治系统量子力学问题给予系统介绍。

非自治系统量子力学研究的量子系统的 Hamilton 量的参数与时间有关, 体现了环境对系统的影响或人类对量子系统的控制。对这类系统的处理需要发展新的理论方法, 其中代数动力学理论显得特别系统与成功。由于许多人造的量子系统的 Hamilton 量是含时间的，非自治系统量子力学理论方法对人造的量子系统特别是量子调控系统的研究, 就具有特别重要的实用价值。这方面的内容将在第二篇第 14

章以“量子对称运动模式和代数动力学”的标题给予详细介绍。

量子力学几何相位是近 30 年的新发现，充分揭示了量子运动的波动特性和量子态波函数的相位的客观物理内涵，以及物理空间拓扑性质对微观量子态的影响。量子力学几何相位是非自洽量子系统具有的普遍性质, 也具有重要的理论意义和实用价值。第 9 章将介绍这方面的主要内容。

量子力学的其他近期发展，包括量子 Hall-效应，拓扑量子力学, Bose-Einstein 凝聚，Josephson 效应，Casimir 效应，Bell 定理与实验验证，量子态纠缠与退相干，量子信息、量子通信与量子计算等, 第 10 章将简要介绍这方面的物理内容。

量子调控系统的近期研究, 使人们认识到非 Markov 动力学对于描述量子信息系统的重要性。环境对系统的塑造作用和系统对环境的反作用, 开始进入人们的研究视线。第二篇第 15 章以“系统–环境耦合运动模式与耦合动力学”为标题, 介绍这方面的初步尝试, 抛砖引玉, 期盼引起人们对这一新课题的注意和研究。

自 Planck、Einstein 和 Bohr 发现光量子、光电效应和原子能级的量子结构以来, 量子论包括量子力学和量子场论, 经历了 110 多年的发展, 内容十分丰富, 成就极其辉煌。在量子论的应用和发展过程中, 人们加深了对它的理论结构和物理本质的认识。第 1 章从时空观、运动学和动力学以及物理自由度和观测理论的高度, 审视了量子力学的理论结构; 从真空量子涨落的深度, 理解量子力学与经典力学的关系, 从而凸显出量子化的物理本质和量子论的物质基础。第 11 章则从广阔的视野对量子力学问题进行分类, 以帮助人们看清问题所处的位置与实质。分类的依据包括：动力学类型 (结构、衰变和反应问题), 认识路线 (正、反问题), 可积性和非线性度, 运动类型 (规则运动与不规则运动), 运动模式 (关联、对称和耦合模式), 系统和环境的关系, 自治系统与非自治系统, 自然系统与人造系统, 等等。

## 参 考 文 献

[1] Dirac P A M. The Principle of Quantum Mechanics. Oxford University Press, 1958. 狄拉克 P A M. 量子力学原理. 陈咸亨译. 北京: 科学出版社, 1966.

[2] Messiah A. Quantum Mechanics. I, II. Amsterdam: North Holland, 1961.

[3] 王顺金. 人造量子系统的理论研究与代数动力学. 物理学进展, 1999, 19(4): 331–370.

[4] Feynman R F. Rev Mod Phys, 1948, 20: 367.

[5] Feynman R F, Ribbs A. Quantum Mechanics and Path Integrals. New York: McGraw-Hill, 1965.

[6] Nelson E. Phys Rev, 1966, 110(4): 1079.

[7] Parisi G, Wu Y S. Scientia Sinica, 1981, 24(4): 35–48.

[8] Damgaard P H, Hueffel H. Stochastic Quantization. Singapore: World Scientific Publishing, 1988.

[9] Goldstein H. Classical Mechanics.2nd ed. New York: Addison-Welsley, 1980.
[10] Itzykson C, Zuber J-B. Quantum Field Theory. I, II. New York: McGraw-Hill, 1980.
[11] 张礼, 葛墨林. 量子力学的前沿问题. 北京: 清华大学出版社, 2000.
[12] 曾谨言, 龙桂鲁, 裴寿镛. 量子力学新进展. 北京：清华大学出版社, 2003.

# 第 2 章　对称性理论与守恒定律

物理学研究物理世界的运动规律, 而物理世界的所谓的运动规律不过是物理世界各种守恒定律的体现。量子力学研究微观世界的运动规律, 即微观世界的各种守恒定律。这些守恒定律可分两类：适用于各种微观系统的比较普遍的守恒定律和与微观系统特性有关的特殊的守恒定律。物理系统普遍的守恒定律如动量、能量、角动量守恒等, 来自物理时空背景的普遍的对称性, 而物理系统特殊的守恒定律来自物理系统相互作用的对称性。对称性理论研究物理守恒定律与物理时空背景的对称性和物理系统相互作用的对称性的关系。

本章着重介绍微观系统的比较普遍的守恒定律, 揭示这些守恒定律与时空背景对称性的深刻联系。由于对称性理论涉及微观世界的守恒定律, 它就成为微观世界的动力学的基础, 而本章成为量子论的基本内容。

## 2.1　物理系统的对称性与守恒定律

对称性在自然界和日常生活中都是常见的，它体现了一种自然美和人文美。从物理学的观点考察, 在对称性的后面，隐藏着某种物理规律性。本章的目的就是揭示物理系统的对称性与其相关的物理规律性之间的深刻联系[1-7]。

### 2.1.1　对称性

系统的某种对称性是指系统在某种运动、变换下的不变性。如球体绕其中心的任意转动下是不变的，等边三角形绕其中心转动 120°、240° 也是不变的。这是物体的几何对称性。物理系统在自由空间 (真空背景) 中的平移、转动下，其内部性质也是不变的，这与空间 (真空背景) 的性质有关，表明它对物体的影响是均匀的，各向同性的。系统还有一些对称性与系统内部的作用力的性质有关，如中心力具有转动不变性，导致系统的角动量守恒等。因此，物理系统的对称性是多种多样的，其根源也是多种多样的。

### 2.1.2　对称性的分类

物理系统的对称性可分为以下两类。

1) 外部环境的对称性

(1) 时空背景的对称性，时空平移、空间转动、时空反演 (射) 等对称性；

(2) 物理背景的对称性，如晶体平移对称性与点群对称性 (空间群对称性)。

2) 内部相互作用的对称性

(1) 相互作用的整体对称性，如夸克模型的 SU(3) 对称性；

(2) 相互作用的局域对称性，如量子色动力学 (QCD) 的色 SU(3) 对称性；

(3) 动力学对称性，与系统的 Hamilton $\widehat{H}$ 的结构有关的对称性，它与某种量子运动模式的存在和守恒有关, 如氢原子中电子与原子核 Coulomb 相互作用的 SO(4) 对称性。

### 2.1.3　对称性的表述

设系统 $\hat{H}$(以后用系统的 Hamilton $\hat{H}$ 表示该系统) 对若干种变换 $\hat{S}_i, \hat{S}_j$ 具有不变性，按量子力学算符变换理论, 这些不变性可表为

$$\hat{S}_i \hat{H} \hat{S}_i^{-1} = \hat{H} \quad 或 \quad [\hat{S}_i, \hat{H}] = 0 \tag{2-1a}$$

$$\hat{S}_j \hat{H} \hat{S}_j^{-1} = \hat{H} \quad 或 \quad [\hat{S}_j, \hat{H}] = 0 \tag{2-1b}$$

同时可证, 系统对这两个变换的联合变换 $(\hat{S}_j \hat{S}_i)$ 也是不变的：

$$(\hat{S}_j \hat{S}_i) \hat{H} (\hat{S}_j \hat{S}_i)^{-1} = \hat{S}_j \hat{S}_i \hat{H} \hat{S}_i^{-1} \hat{S}_j^{-1} = \hat{H} \to [\hat{S}_j \hat{S}_i, \hat{H}] = 0 \tag{2-1c}$$

即 $(\hat{S}_j \hat{S}_i)$ 也是对称变换，因此对称变换具有封闭性。此外，从定义可知，对称变换一定是可逆的，即若 $\hat{S}_i$ 存在，则逆元 $\hat{S}_i^{-1}$ 也存在，且

$$[\hat{S}_i^{-1}, \hat{H}] = 0 \tag{2-2a}$$

$$\hat{S}_i \hat{S}_i^{-1} = \hat{S}_i^{-1} \hat{S}_i = I \tag{2-2b}$$

即恒元 $I$ 也存在。此外，对称变换还满足结合律，因为

$$\begin{gathered}
(\hat{S}_j \hat{S}_k) = \hat{S}_j \hat{S}_k \to (\hat{S}_j \hat{S}_k) \hat{S}_k^{-1} = \hat{S}_j \\
\hat{S}_i (\hat{S}_j \hat{S}_k) \hat{S}_k^{-1} = \hat{S}_i \hat{S}_j = (\hat{S}_i \hat{S}_j) \\
\hat{S}_i (\hat{S}_j \hat{S}_k) = (\hat{S}_i \hat{S}_j) \hat{S}_k
\end{gathered} \tag{2-3}$$

因此, 对称变换的全体 $S = \{\hat{S}_i\}$ 符合群的公理, 构成一个群，称为系统 $\hat{H}$ 的对称群。

### 2.1.4　对称性的后果

(1) 对称性导致守恒定律：按照力学量的 Heisenberg 运动方程, 因为

$$[\hat{S}_i, \hat{H}] = 0 \tag{2-4a}$$

所以

$$\frac{\mathrm{d}\hat{S}_i}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{S}_i, \hat{H}] = 0 \tag{2-4b}$$

故 $\hat{S}_i$ 是守恒量。应特别强调, 对称群的所有元素 $\hat{S}_i(i = 1, 2, \cdots, N)$ 单独看，都是守恒量，但这并不表示它们可以同时观测，只有彼此互易的守恒量才可以同时观测。元素$\{\hat{S}_i\}$中究竟有多少个元素彼此可对易, 这是由对称群 $S$ 自身的性质决定的。

(2) 对称算符 $\hat{S}_i$ 与 $\hat{H}$ 有共同的本征函数， 而且能量对 $\hat{S}_i$ 的本征值简并：

若状态 $\psi_n$ 是 $\hat{H}$ 的本征态

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n \tag{2-5a}$$

则由式 (2-4a) 有

$$\hat{H}(\hat{S}_i\psi_n) = E_n(\hat{S}_i\psi_n) \tag{2-5b}$$

故另一状态 $\psi_{ni} = \hat{S}_i\psi_n$ 也是 $\hat{H}$ 的本征态且能量仍为 $E_n$, 因此对称群 $S$ 造成能级简并 (同一能级上有一个以上的不同状态)。设所有 $\psi_{ni} = \hat{S}_i\psi_n$ $(i = 1, 2, \cdots, N)$ 生成一个 $M$ 维子空间 (一般 $\psi_{ni}$ 不线性独立, 故 $M \leqslant N$)，用 $\psi_{ni}$ 构造出 $M$ 个独立基矢，则可以在这子空间内把互易的算子集$\{\hat{S}_\alpha\}$同时对角化，其共同本征矢 $\psi_{nm_\alpha}$ 是 $\psi_{ni}$ $(i = 1, 2, \cdots, M)$ 的线性组合，$\psi_{nm_\alpha}$ 对 $\hat{S}_\alpha$ 的本征值设为 $m_\alpha$，即

$$\hat{S}_\alpha\psi_{nm_\alpha} = m_\alpha\psi_{nm_\alpha} \tag{2-6a}$$

由 $\psi_{nm_\alpha}$ 是 $\psi_{ni}$ 的线性组合及式 (2-5b) 有

$$\hat{H}\psi_{nm_\alpha} = E_n\psi_{nm_\alpha} \tag{2-6b}$$

即 $\hat{H}$ 与 $\hat{S}_\alpha$ 有共同的本征函数 $\psi_{nm_\alpha}$，且能量 $E_n$ 对 $\hat{S}_\alpha$ 的 $M$ 个本征态 $\psi_{nm_\alpha}$ 简并。

但是如果 $\hat{S}_i$ 与 $\hat{S}_j$ 不对易，则它们没有共同的本征函数，故 $\hat{H}$ 不可能与所有的 $\hat{S}_i$ 有共同的本征函数。设 $S = \{\hat{S}_i, i = 1, 2, \cdots, N\}$ 有 $r$ 个互易元素 $\hat{S}_\alpha(\alpha = 1, 2, \cdots, r)$，即

$$[\hat{S}_\alpha, \hat{S}_\beta] = 0 \tag{2-7}$$

则 $\hat{H}$ 与 $\{\hat{S}_\alpha|\alpha = 1, 2, \cdots, r\}$ 组成一个互易算子集 (commuting operators, CO)

$$\mathrm{CO} = \{\hat{H}, \hat{S}_\alpha|\alpha = 1, 2, \cdots, r\} \tag{2-8}$$

如上所述, 它们有共同的本征函数 $\psi_{nm_\alpha}$。

显然，能量 $E_n$ 对对称群生成的所有量子态简并。通常 $\hat{S}_\alpha(\alpha=1,2,\cdots,r)$ 的共同的本征函数的数目有限 ($M$ 个)。这时，能级是 $M$ 重简并，$\psi_{nm_\alpha}$ 在能级 $E_n$ 上仿射出对称群 $S$ 的一个 $M$ 维表示空间。

以氢原子为例。其互易的算子集是完备的，称为可互易完备算子集 (complete set of commuting operators，CSCO)

$$\mathrm{CSCO}=\{\hat{H},\hat{l}^2,\hat{l}_z\} \tag{2-9}$$

其共同本征函数为 $\psi_{nlm}$, 其本征方程为

$$\hat{H}\psi_{nlm}=E_n\psi_{nlm} \tag{2-10a}$$

$$\hat{l}^2\psi_{nlm}=l(l+1)\psi_{nlm} \tag{2-10b}$$

$$\hat{l}_z\psi_{nlm}=m\psi_{nlm} \tag{2-10c}$$

$E_n$ 的简并度可从该能级可容纳的角动量 $l(=0,1,\cdots,n-1)$ 和其磁量子数的数目 $2l+1$ 计算

$$M_n=\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1)=n(n-1)+n=n^2 \tag{2-11a}$$

考虑电子自旋后，应为

$$M_n^s=2n^2 \tag{2-11b}$$

每个能壳 $E_n$ 可填充的电子数为

$$n=1,2,3,4,5,6,\cdots$$
$$M_n^s=2,8,18,32,50,72,\cdots$$

这正是氢原子的满壳层电子数。

### 2.1.5 简并子空间的量子态按对称群不可约表示分类

设对称群 $S=\{\hat{S}_i\}$ 为李群, 其第二类完备算子集定义为

$$\mathrm{CSCOII}=\{\hat{C}_i,\hat{H}_\alpha\} \tag{2-12}$$

其中，$\hat{C}_i$ 是对称群的群链 $(G_s\supset G_i\supset\cdots)$ 的 Casimir 算子，$\hat{H}_\alpha$ 为 Cartan 算子集，它们彼此对易

$$[\hat{C}_i,\hat{C}_j]=0,\quad [\hat{H}_\alpha,\hat{H}_\beta]=0,\quad [\hat{C}_i,\hat{H}_\alpha]=0 \tag{2-13}$$

显然，对称群的 CSCOII 与系统的 Hamilton 量 $\hat{H}$ 对易，共同组成系统 $\hat{H}$ 的完备互易算子集

$$\mathrm{CSCOII}(H)=\{\hat{H},\hat{C}_i,\hat{H}_\alpha\} \tag{2-14}$$

它们的共同本征函数 $\psi_{nn_in_\alpha}$ 满足下列本征方程

$$\hat{H}\psi_{nn_in_\alpha} = E_n\psi_{nn_in_\alpha} \tag{2-15a}$$

$$\hat{C}_i\psi_{nn_in_\alpha} = n_i\psi_{nn_in_\alpha} \tag{2-15b}$$

$$\hat{H}_\alpha\psi_{nn_in_\alpha} = n_\alpha\psi_{nn_in_\alpha} \tag{2-15c}$$

共同本征函数 $\psi_{nn_in_\alpha}$ 给出系统状态的完全描述 (即每一个能级上的所有状态都有唯一的波函数和量子数与之对应, 不重复, 不遗漏)，而且同一个 $n$ 而 $\{n_i, n_\alpha\}$ 不同的 $M_n$ 个状态具有相同的能量 $E_n$，因而是简并的 ($M_n$ 称简并度)。不考虑对称群的 CSCOII，这 $M_n$ 个简并的状态没有分类和标志；考虑了对称群的 CSCOII 后，这个 $M_n$ 维子空间则按照对称群的量子数 $\{n_i, n_\alpha\}$ 分类。因为对称群的 CSCOII 是完全的 (无量子数遗漏)，故这个分类也是完全的。基矢 $\psi_{nn_in_\alpha}$ 构成对称群的 CSCOII 的 $M_n$ 维表示的基矢，而且是不可约的 (不能再分成更小的对称群的不变子空间，该子空间内的任何态矢被对称群任何元素作用后仍会停留在该子空间内, 因此它对对称群的作用是不变的)。因此对称群 $S$ 的 CSCOII 给出系统 $\hat{H}$ 的简并能级的量子态子空间的一个完全的分类，按对称群不可约表示的分类。

氢原子是一个典型的例子, 现在按前面论述的构造对称群的不可约表示的规则, 把这个例子详述一遍。其转动对称群 SO(3) 的生成元为 $\mathrm{so}(3) = \{\hat{l}_i | i = x, y, z\}$，SO(3) 的第二类互易完备算子集为

$$\mathrm{CSCOII}(\mathrm{so}(3)) = \{\hat{C}_i, \hat{H}_\alpha\} = \{\hat{l}^2, l_z\} \tag{2-16}$$

系统 $\hat{H}$ 的互易完备算子集是

$$\mathrm{CSCOII}(H) = \{\hat{H}, \hat{C}_i, \hat{H}_\alpha\} = \{\hat{H}, \hat{l}^2, l_z\} \tag{2-17}$$

它们的共同本征函数为 $\psi_{nlm}$

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi_{nlm} &= E_n\psi_{nlm} \\ \hat{l}^2\psi_{nlm} &= l(l+1)\psi_{nlm} \\ \hat{l}_z\psi_{nlm} &= m\psi_{nlm} \end{aligned} \tag{2-18}$$

$E_n$ 的简并度为

$$M_n = \sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = n(n-1) + n = n^2 \tag{2-19a}$$

考虑电子自旋后，应为

$$M_n^s = 2n^2 \tag{2-19b}$$

不利用群 SO(3)，这 $n^2$ 个简并态没有分类；用了群 SO(3) 的 CSCOII 后，这 $n^2$ 维子空间就按群 SO(3) 的不可约表示分成 $l=0,1,\cdots,(n-1)$ 个子空间，每一个 $l$ 确定的子空间为 $2l+1$ 维, 它们不可再分为更小的群 SO(3) 的不变子空间了，故称为不可约子空间。

本征值 $\{n,l,m\}$ 是一个完全的量子数集合，完全标志了量子态而既没有遗漏也没有重复，同一 $n$ 不同 $\{l,m\}$ 的量子态是简并 (有相同的能量 $E_n$)，$\{l,m\}$ 是对称群 SO(3) 的量子数，也是其不可约表示基矢 $Y_{lm}$ 的指标。因此，对称群 SO(3) 的不可约表示给出氢原子量子态的一个完全分类 (对简并态子空间的分类)，而 $Y_{lm}$ 是群 SO(3) 的不可约表示空间的基矢。

下面运用上述一般理论, 具体而详细地讲述物理系统的普遍的各种对称性及相应的守恒定律, 包括：①空间各向同性与系统的转动不变性，其后果是角动量守恒；②时间均匀性与系统的时间平移不变性，其后果是能量守恒；③空间均匀性与系统的空间平移不变性，其后果是动量守恒；④基本物理过程可逆性与系统的时间反演不变性, 对称变换是反幺正的, 不产生守恒量；⑤空间反射不变性，其后果是宇称守恒；⑥全同粒子置换对称性，其后果是统计性守恒。

## 2.2 空间各向同性和系统的转动对称性——角动量守恒——角动量理论精要

### 2.2.1 空间各向同性与系统的转动不变性

自由空间或真空作为物理事件发生的背景, 具有空间各向同性的性质 (真空各个方向的性质及其对物理系统的影响都一样)，即一个物理系统不论其空间取向如何，真空对其内部性质的影响都是一样的, 即真空背景对物理系统的影响是各向同性的。我们把物理系统的这种相对真空背景的空间取向的不变性几何化后, 称为空间转动不变性或转动对称性。具有转动对称性的系统，其相应的对称群为转动群 [1-7]。

空间转动群的生成元为角动量算子 $\hat{J}_i(i=x,y,z)$，如系统没有内禀自旋 (如无自旋标量粒子)，则

$$\hat{J}_i=\hat{l}_i(i=x,y,z),\quad \hat{l}_x=-\mathrm{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\right)\quad (\hbar=1) \tag{2-20a}$$

下标轮换得 $\{\hat{l}_y,\hat{l}_z\}$。转动群的李代数为 $\mathrm{so}(3)=\{\hat{l}_i|i=x,y,z\}$。如粒子的自旋为 1/2，则

$$\hat{J}_i=\hat{l}_i+\frac{1}{2}\sigma_i\quad (i=x,y,z) \tag{2-20b}$$

$\sigma_i$ 为 Pauli 矩阵：

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{2-20c}$$

这时转动群应扩展为其覆盖群 SU(2), 其李代数为 $\mathrm{su}(2) = \{\hat{J}_i | i = x, y, z\}$。其生成元的对易关系与 so(3) 一样

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = \mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\hat{J}_k \tag{2-21}$$

转动群的群元可写成

$$\hat{R}(\alpha, \beta, \gamma) = \exp(-\mathrm{i}\gamma\hat{J}_z)\exp(-\mathrm{i}\beta\hat{J}_y)\exp(-\mathrm{i}\alpha\hat{J}_z) \tag{2-22}$$

欧拉角 $\varOmega = (\alpha, \beta, \gamma)$ 取值范围是 $0 \leqslant \alpha, \gamma \leqslant 2\pi, 0 \leqslant \beta \leqslant \pi$。$(\alpha, \beta)$ 取值用以覆盖普通空间的一切转动，$\gamma$ 取值用以覆盖内禀自旋空间的转动。群元用连续参数表示而且可微的群称为李群，SU(2)[SO(3)] 是李群的一种。

系统 $\hat{H}$ 的转动不变性的数学表达为

$$[\hat{R}(\varOmega), \hat{H}] = 0, \quad \hat{R}(\varOmega)\hat{H}\hat{R}^{-1}(\varOmega) = \hat{H} \tag{2-23a}$$

或等价于

$$[\hat{J}_i, \hat{H}] = 0 \quad (i = x, y, z) \tag{2-23b}$$

因此, $\hat{H}$ 是标量算子。

### 2.2.2 转动群的不可约表示，两个角动量的耦合与 C-G 系数

转动群是 $\hat{H}$ 的对称群，它可以对系统的量子态进行分类。分类是按对称群的不可约表示进行的[1-7]。而求转动群的不可约表示，归结为找出其生成元的第二类完备的互易算子集 CSCOII。从氢原子这个例子, 知道

$$\mathrm{CSCOII}(\mathrm{so}(3)) = \{\hat{C}_i, \hat{H}_\alpha\} = \{\hat{l}^2, \hat{l}_z\} \tag{2-24a}$$

推广到有自旋情况

$$\mathrm{CSCOII}(\mathrm{su}(2)) = \{\hat{C}_i, \hat{H}_\alpha\} = \{\hat{J}^2, \hat{J}_z\} \tag{2-24b}$$

找 SO(3)(SU(2)) 不可约表示, 归结为求 CSCOII[SO(3)] 的共同本征函数。对群 SO(3) 已知为 $Y_{lm}(\theta, \varphi)$：

$$\hat{l}^2 Y_{lm} = l(l+1)Y_{lm} \tag{2-25a}$$

$$\hat{l}_z Y_{lm} = mY_{lm} \tag{2-25b}$$

无自旋粒子的 $\hat{H}$ 本征态为 $\psi_{nlm}$：

$$\psi_{nlm} = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) \tag{2-26}$$

$$\hat{H}\psi_{nlm} = E_n \psi_{nlm} \tag{2-27}$$

对自旋为 1/2 的粒子，要求出 $\{\hat{J}^2, \hat{J}_z\}$ 的共同的本征态，它们组成群 SU(2) 不可约表示空间的基矢。先求自旋空间的本征值问题。自旋算符的完备集为 $\{\hat{S}^2, \hat{S}_z\}$，它们的共同的本征函数为 $\chi_{s\nu}(\nu = \pm 1)$：

$$\chi_{s+1} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_{s-1} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{2-28}$$

易证

$$\hat{S}^2 \chi_{s\nu} = s(s+1)\chi_{s\nu} = \frac{3}{4}\chi_{s\nu} \tag{2-29a}$$

$$\hat{S}_z \chi_{s\nu} = \frac{\nu}{2}\chi_{s\nu}, \quad \hat{S}_z = \frac{1}{2}\sigma_z = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{2-29b}$$

求 $\{\hat{J}^2, \hat{J}_z\}$ 的共同本征函数，涉及两个角动量相加的问题。已知 $\{\hat{l}^2, \hat{l}_z\}$ 的本征态为 $Y_{lm}$ 和 $\{\hat{S}^2, \hat{S}_z\}$ 的本征态为 $\chi_{s\nu}$，求两个角动量之和的算子集 $\{\hat{J}^2, \hat{J}_z\}$ 的共同本征函数。因为自旋空间与普通空间相互独立, 自旋算子与轨道角动量算子互易, 因此有

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha J_z} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha(\hat{l}_z + \hat{S}_z)} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha\hat{l}_z} \cdot \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha\hat{S}_z} \tag{2-30}$$

式 (2-30) 表明, 角动量 $\hat{l}_z$ 和 $\hat{S}_z$ 在群元指数上的相加性导致群元相乘，进而表示群元作用的函数空间 $\{Y_{lm}\}$ 和 $\{\chi_{s\nu}\}$ 是相乘的。因此，$\{\hat{J}^2, \hat{J}_z\}$ 的共同本征函数 $\psi_{JM}$ 必然是 $\{Y_{lm}\}$ 和 $\{\chi_{s\nu}\}$ 相乘的线性组合

$$\psi_{JM} = \sum_{m\nu} C_{lm,s\nu}^{JM} Y_{lm}\chi_{s\nu} \tag{2-31}$$

线性叠加系数 $C_{lm,s\nu}^{JM}$ 称为角动量耦合系数或 Clebsh-Gordon 系数 (C-G 系数)，它由角动量耦合条件、其本征方程及基矢的正交归一条件定出。耦合条件和本征方程为

$$\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{l}} + \hat{\vec{S}} \tag{2-32}$$

$$\hat{J}^2 \psi_{JM} = J(J+1)\psi_{JM}, \quad \hat{J}_z \psi_{JM} = M\psi_{JM} \tag{2-33}$$

由于考虑自旋后的完备算子集为

$$\mathrm{CSCOII(su(2))} = \{\hat{J}^2, \hat{J}_z, \hat{l}^2, \hat{S}^2\} \tag{2-34}$$

$\psi_{JM}$ 还应是 $\hat{l}^2, \hat{S}^2$ 的本征态。直接计算可知的确如此：

$$\hat{l}^2\psi_{JM} = l(l+1)\psi_{JM}, \quad \hat{S}^2\psi_{JM} = s(s+1)\psi_{JM} \tag{2-35}$$

由上述条件定出的 C-G 系数有表可查，其量子数满足矢量相加法则 (三角形法则)：

$$|l-s| \leqslant J \leqslant l+s, \quad M = m+\nu$$

值得注意的是，两个角动量耦合之后，得出 (2$s$+1) 个 (如 $s<l$) 不同的 $J$ 标志的子空间都是 SU(2) 的不等价不可约表示空间，它们是彼此正交的子空间，从 $\{Y_{lm}\}$ 和 $\{\chi_{s\nu}\}$ 的正交归一性和 C-G 系数的性质，不难证明

$$\langle\psi_{JM}|\psi_{J'M'}\rangle = \delta_{JJ'}\delta_{MM'} \tag{2-36}$$

因此从基矢 $\{Y_{lm}\chi_{s\nu}\}$ 到基矢 $\{\psi_{JM}\}$ 的变换是幺正变换

$$\sum_{m\nu} C^{JM}_{lms\nu} C^{J'M'}_{lms\nu} = \delta_{JJ'}\delta_{MM'}, \quad \sum_{JM} C^{JM}_{lms\nu} C^{JM}_{lm'sv'} = \delta_{mm'}\delta_{\nu\nu'} \tag{2-37}$$

幺正变换自然保持 Hilbert 空间的维数 (基矢的数目) 不变，可验证如下：

$$\{Y_{lm}\chi_{s\nu}\}\text{表示的基矢数为}(2l+1)(2s+1)$$

$$\{\psi_{JM}\}\text{表示的基矢数为}\sum_{J=|l-s|}^{l+s}(2J+1) = (2l+1)(2s+1)$$

对 $\{Y_{lm}\chi_{s\nu}\}$ 基矢，总角动量 $J$ 是不确定的，由它们仿射的子空间尚未约化。事实上，从式 (2-31) 的逆变换

$$Y_{lm}\chi_{s\nu} = \sum_{J=|l-s|}^{l+s} C^{JM}_{lms\nu}\psi_{JM} \tag{2-38}$$

可以看出 $Y_{lm}\chi_{s\nu}$ 是按不同 $J$ 的本征函数 $\{\psi_{JM}\}$ 展开的, 故 $J$ 不确定, 其取值区间为 $[|l-s|, l+s]$，因此 $Y_{lm}\chi_{s\nu}$ 不是 SU(2) 不可约表示的基矢。变到 $\{\psi_{JM}\}$ 表象中后，每一个 $J$ 都构成 SU(2) 的一个不可约表示，它们是彼此正交的子空间，即角动量耦合的幺正变换式 (2-31) 把可约的 $\{Y_{lm}\chi_{s\nu}\}$ 空间分解为 (2$s$+1) 个彼此正交的 $\{\psi_{JM}\}$ 不可约子空间的直和

$$\{Y_{lm}\chi_{s\nu}\} = \sum_{J=|l-s|}^{l+s} \oplus\{\psi_{JM}\} \tag{2-39}$$

如用 $\{\psi_{JM}\}$ 计算 $\hat{J}_i$ 的矩阵元，则它们是对角方阵

$$\underline{J_i} = \begin{pmatrix} X & 0 & 0 \\ 0 & Y & 0 \\ 0 & 0 & Z \end{pmatrix} \tag{2-40}$$

称两角动量耦合的直积空间 $\{Y_{lm}\chi_{s\nu}\}$ 可约化为 $(2s+1)$ 个不可约表示空间 $\{\psi_{JM}\}$ 的直和，其中算子 $\hat{J}_i$ 的矩阵表示均为对角方阵 $(X, Y, Z$ 均为方阵)。

### 2.2.3　转动群元 $\hat{R}(\Omega)$ 的矩阵表示：$D$-函数

转动算符 $\hat{R}(\Omega)$ 作用到不可约表示空间 $\{\psi_{JM}\}$，不改变角动量量子数 $J$，只改变磁量子数 $M$，把该空间内的一个态矢转动成另一个。由于 $\{\psi_{JM}\}$ 是完备的，因此，$\hat{R}(\Omega)|\psi_{JM}\rangle$ 是 $\{\psi_{JM}\}$ 的线性组合

$$\hat{R}(\Omega)|\psi_{JM}\rangle = \sum_{M'} D^J_{M'M}(\Omega)|\psi_{JM'}\rangle \tag{2-41}$$

其中，$D$-函数是转动群元 $\hat{R}(\Omega)$ 在 $\{\psi_{JM}\}$ 空间的变换矩阵, 即 $\hat{R}(\Omega)$ 在 $\{\psi_{JM}\}$ 空间的表示矩阵。由 $\{\psi_{JM}\}$ 的正交归一性得

$$D^J_{M'M}(\Omega) = \langle\psi_{JM'}|\hat{R}(\Omega)|\psi_{JM}\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha M'} d^J_{M'M}(\beta)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma M} = D^J_{M'M}(\alpha,\beta,\gamma) \tag{2-42a}$$

$$d^J_{M'M}(\beta) = \langle\psi_{JM'}|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\beta\hat{J}_y}|\psi_{JM}\rangle \tag{2-42b}$$

其中，$D$-函数有一般的解析公式可查。因 $\hat{R}(\Omega)$ 是幺正变换 $\hat{R}^{+} = \hat{R}^{-1}$，它把一组正交基矢 $\{\psi_{JM}\}$ 变为另一组正交基矢 $\{\hat{R}\psi_{JM}\}$，所以作为 $\hat{R}$ 的变换矩阵的 $D$-函数就是转动算子在不可约表示空间 $\{\psi_{JM}\}$ 中的表示，它自然也是幺正的：

$$\sum_{M'} D^{J*}_{MM'}(\alpha,\beta,\gamma) D^J_{MM''}(\alpha,\beta,\gamma) = \delta_{M'M''} \tag{2-43}$$

因 $\{\psi_{JM}\}$ 对所有的 $J$，$M$ 构成了角动量表示空间的一组完备基矢，该空间的任意函数可按它们展开

$$\psi(\theta,\varphi,S_z) = \sum_{JM} C_{JM}\psi_{JM}(\theta,\varphi,S_z) \tag{2-44}$$

它在转动算符作用下的变换为

$$\begin{aligned}\hat{R}(\Omega)\psi(\theta,\varphi,S_z) &= \sum_{JM} C_{JM}\hat{R}(\Omega)\psi_{JM}(\theta,\varphi,S_z) = \sum_{JM} C_{JM}\sum_{M'} D^J_{M'M}(\Omega)\psi_{JM'} \\ &= \sum_{JM'} C_{JM'}(\Omega)\psi_{JM'},\end{aligned}$$

$$C_{JM'}(\Omega) = \sum_{M} C_{JM} D^J_{M'M}(\Omega) \tag{2-45}$$

式 (2-45) 表明，态矢的展开式的系数 $C_{JM}$(矢量的分量) 分别在各自的 $J$ 空间内变换，即转动群元素的矩阵表示在 $\{\psi_{JM}\}$ 表象中是按 $J$ 约化的：

$$\langle\psi_{JM}|\hat{R}(\Omega)|\psi_{J'M'}\rangle = \delta_{JJ'} D^J_{M'M}(\Omega) \tag{2-46a}$$

或

$$\underline{R(\varOmega)} = \begin{pmatrix} D^{J_1} & 0 & 0 \\ 0 & D^{J_2} & 0 \\ 0 & 0 & D^{J_3} \end{pmatrix} \tag{2-46b}$$

$D^{J_i}$ 为 $2J_i+1$ 阶方阵。

### 2.2.4　不可约张量算符，Wigner-Eckart 定理与选择定则

不可约张量算符 $\hat{T}_{\lambda\mu}$ 按变换性质定义为它在转动群作用下具有基矢 $\psi_{\lambda\mu}$ 那样的变换性质

$$\hat{R}(\varOmega)\hat{T}_{\lambda\mu}\hat{R}^{-1}(\varOmega) = \sum_{\mu'} D^{\lambda}_{\mu'\mu}(\varOmega)\hat{T}_{\lambda\mu'} \tag{2-47}$$

类似于两个矢量 $\psi_{\lambda_1\mu_1}$ 和 $\psi_{\lambda_2\mu_2}$ 的乘积可以耦合成 $\psi_{\lambda\mu}$，即

$$\psi_{\lambda\mu} = \sum_{\mu_1\mu_2} C^{\lambda\mu}_{\lambda_1\mu_1\lambda_2\mu_2}\psi_{\lambda_1\mu_1}\psi_{\lambda_2\mu_2} \tag{2-48}$$

两个不可约张量 $\hat{T}_{\lambda_1\mu_1}$ 和 $\hat{T}_{\lambda_2\mu_2}$ 也可以耦合成 $\hat{T}_{\lambda\mu}$，即

$$\hat{T}_{\lambda\mu} = \sum_{\mu_1\mu_2} C^{\lambda\mu}_{\lambda_1\mu_1\lambda_2\mu_2}\hat{T}_{\lambda_1\mu_1}\hat{T}_{\lambda_2\mu_2} \tag{2-49}$$

其中，$(\lambda,\mu)$ 的取值也满足矢量相加的三角形法则：

$$|\lambda_1-\lambda_2| \leqslant \lambda \leqslant \lambda_1+\lambda_2, \quad \mu=\mu_1+\mu_2 \tag{2-50}$$

原子物理和原子核物理中的多极矩算子

$$Q_{\lambda\mu} = Q_0 r^{\lambda} Y_{\lambda\mu}(\theta,\varphi) \tag{2-51}$$

就是 λ-极不可约张量算子的例子，其转动变换规则为

$$\hat{R}(\varOmega)Q_{\lambda\mu}\hat{R}^{-1}(\varOmega) = \sum_{\mu'} D^{\lambda}_{\mu'\mu}(\varOmega)Q_{\lambda\mu'} \tag{2-52}$$

$\hat{T}_{\lambda\mu}$ 作用在态矢 $\psi_{jm}$ 上后 $(\hat{T}_{\lambda\mu}\psi_{jm})$ 的变换性质为

$$\begin{aligned}\hat{R}(\varOmega)\hat{T}_{\lambda\mu}\psi_{jm} &= \hat{R}(\varOmega)\hat{T}_{\lambda\mu}\hat{R}^{-1}(\varOmega)\hat{R}(\varOmega)\psi_{jm} \\ &= \sum_{\mu'} D^{\lambda}_{\mu'\mu}(\varOmega)\hat{T}_{\lambda\mu'}\sum_{m'} D^{j}_{m'm}(\varOmega)\psi_{jm'}\end{aligned} \tag{2-53}$$

因此，$\hat{T}_{\lambda\mu}\psi_{jm}$ 的变换性质与 $\psi_{\lambda\mu}\psi_{jm}$ 的变换性质一样，因此可以耦合成总角动量为 $(JM)$ 的态，

$$\psi_{JM} = \sum_{m\mu} C_{\lambda\mu}{}^{JM}{}_{jm} \hat{T}_{\lambda\mu}\psi_{jm} = (\hat{T}_\lambda \psi_j)_{JM} \tag{2-54}$$

其逆变换为

$$\hat{T}_{\lambda\mu}\psi_{jm} = \sum_{JM} C_{\lambda\mu}{}^{JM}{}_{jm} (\hat{T}_\lambda \psi_j)_{JM} = \sum_{JM} C_{\lambda\mu}{}^{JM}{}_{jm} \psi_{JM} \tag{2-55}$$

Wigner-Eckart 定理与选择定则：现计算 $\hat{T}_{\lambda\mu}$ 引起的从 $\psi_{jm}$ 态向 $\psi_{j'm'}$ 态的跃迁矩阵元：

$$\begin{aligned}
\langle \psi_{j'm'} | \hat{T}_{\lambda\mu} | \psi_{jm} \rangle &= \langle \psi_{j'm'} \left| \sum_{J} C_{\lambda\mu}{}^{JM}{}_{jm} \right| (\hat{T}_\lambda \psi_j)_{JM} \rangle \\
&= \delta_{j'J}\delta_{m'M} C_{\lambda\mu}{}^{JM}{}_{jm} \langle \psi_{j'} | (\hat{T}_\lambda \psi_j)_J \rangle \\
&= \delta_{j'J}\delta_{m'M} C_{\lambda\mu}{}^{JM}{}_{jm} \langle \psi_{j'} || \hat{T}_\lambda || \psi_j \rangle
\end{aligned} \tag{2-56}$$

Wigner-Eckart 定理的式 (2-56) 揭示了跃迁选择定则, 即跃迁应满足的角动量相加法则

$$\vec{j}' = \vec{\lambda} + \vec{j} = \vec{J}, \quad |j-\lambda| \leqslant J \leqslant j+\lambda, \quad m' = \mu + m = M \tag{2-57}$$

$C_{\lambda\mu}{}^{JM}{}_{jm}(J=j', M=m')$ 是矢量 $\hat{T}_{\lambda\mu}\psi_{jm}$ 在矢量 $\psi_{j'm'}$ 上的分量 (振幅)，这是角动量守恒在状态跃迁振幅上的反映：角动量守恒导致的不可约张量算符 $\hat{T}_{\lambda\mu}$ 引起的态–态跃迁的选择定则。

## 2.3　时空平移对称性和反射对称性

### 2.3.1　时间平移不变性与能量守恒

如果真空背景在时间上是平稳的, 它在不同时刻对物理系统的影响是一样的，即真空背景对物理系统的影响随着时间的流逝是平稳的, 就说时间是均匀的，物理系统对时间平移是不变的，具有时间平移不变性 [1−7]。

时间平移变换 $\hat{T}_\tau$ 的描述及性质：

(1) 对坐标的变换

$$t \to t+\tau, \quad \vec{r} \to \vec{r} \tag{2-58a}$$

(2) 对波函数的变换

$$\hat{T}_\tau \psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}, t+\tau) \tag{2-58b}$$

由微分运算和 Taylor 级数展开可得。

(3) 时间平移算符的表示

$$\hat{T}_\tau = \mathrm{e}^{\tau \frac{\partial}{\partial t}} \tag{2-58c}$$

时间平移的无穷小算符是 $\dfrac{\partial}{\partial t}$；

(4) 对算符的变换

$$\hat{O} \to \hat{T}_\tau \hat{O} \hat{T}_\tau^{-1} \tag{2-58d}$$

(5) 其变换群是单参数 Abelian 群 (只有一维不可约表示)

$$[\hat{T}_\tau, \hat{T}_{\tau'}] = 0 \tag{2-58e}$$

(6) 导致能量守恒：系统 $\hat{H}$ 只要不显含时间$\left(\dfrac{\partial \hat{H}}{\partial t}=0\right)$，必有时间平移不变性

$$\hat{T}_\tau \hat{H} \hat{T}_\tau^{-1} = \hat{H} \to \left[\hat{T}_\tau, \hat{H}\right] = 0 \to \left[\frac{\partial}{\partial t}, \hat{H}\right] = 0 \to \hat{H} \tag{2-59}$$

不显含时间。这时, 由 Heisenberg 方程有

$$\frac{\mathrm{d}\hat{H}}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{H}, \hat{H}] = 0 \tag{2-60}$$

因此, 能量算符 $\hat{H}$ 是守恒量；

(7) $\hat{H}$ 对应时间平移算符 $\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}$：

从 Schroedinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi \tag{2-61}$$

得其解

$$\psi(t+\tau) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}\cdot\tau/\hbar}\psi(t) \tag{2-62}$$

因而 Schroedinger 方程所描述的状态的时间演化不过是使状态在时间上发生一个平移。这也可以由时间平移算子来实现, 即

$$\psi(t+\tau) = \hat{T}_\tau\psi(t) = \mathrm{e}^{\tau\frac{\partial}{\partial t}}\psi(t) \tag{2-63}$$

比较得式 (2-62) 和式 (2-63), 可得

$$\hat{H} = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t} \tag{2-64}$$

因此，$\hat{H}$ 是无穷小时间平移算子 (仅差一个常数因子 $\mathrm{i}\hbar$)，由 $\hat{H}$ 支配下的动力学演化所产生的时间平移，自然保持 $\hat{H}$(能量) 自身守恒。

### 2.3.2　空间平移不变性与动量守恒

自由空间或真空作为物理事件发生的背景具有空间均匀的性质 (真空在空间任意一条直线上各点的性质一样)，即一个物理系统无论放在空间一条直线上的各点，真空对其内部性质的影响都是一样的, 即真空背景对物理系统的影响对空间移

动是均匀的。把物理系统对于真空背景的空间移动的不变性几何化后, 称为空间平移不变性或空间均匀性。

空间平移变换 $\hat{T}_{\vec{a}}$ 的描述及性质：

(1) 对坐标的变换

$$\vec{r} \to \vec{r} + \vec{a}, \quad t \to t \tag{2-65a}$$

(2) 对波函数的变换

$$\hat{T}_{\vec{a}}\psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r} + \vec{a}, t) \tag{2-65b}$$

由微分运算和式 (2-65b) 的 Taylor 级数展开可得

(3) 空间平移算符的表示

$$\hat{T}_{\vec{a}} = \mathrm{e}^{\vec{a}\cdot\vec{\nabla}} \tag{2-65c}$$

$$\vec{\nabla} = \vec{i}\frac{\partial}{\partial x} + \vec{j}\frac{\partial}{\partial y} + \vec{k}\frac{\partial}{\partial z} \tag{2-65d}$$

$\vec{\nabla}$ 是空间平移的无穷小算子 (生成元)，有三个分量，彼此对易，故 $\hat{T}_{\vec{a}}$ 是 Abelian 群；

(4) 空间平移变换群 $\hat{T}_{\vec{a}}$ 是三参数 Abelian 群，可分解为三个方向的 Abelian 群, 只有一维表示；

(5) 对算符的变换 —— 如果系统的 $\hat{H}$ 不显含系统所处的空间坐标 $\vec{r}$，则它具有空间平移不变性

$$\hat{T}_{\vec{a}}\hat{H}\hat{T}_{\vec{a}}^{-1} = \hat{H} \to [\vec{\nabla}, \hat{H}] = 0 \to \vec{\nabla}\hat{H} = 0 \tag{2-66}$$

即 $\hat{H}$ 与 $\vec{r}$ 无关，只能是 $(\vec{r}_i - \vec{r}_j\,)$ 或 $(\vec{r}_i - \vec{R}\,)$ 的函数，如果粒子在一个势场中运动，势场中心坐标为 $\vec{R}$，则在势场中心系中观察，$V(\vec{r} - \vec{R})$ 具有空间平移不变性；

(6) 空间平移不变性导致动量守恒 —— 从 Heisenberg 方程

$$\frac{\mathrm{d}\hat{P}}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{P}, \hat{H}] = -[\vec{\nabla}, \hat{H}] = 0 \tag{2-67}$$

可知，空间平移不变性导致系统的动量 $\vec{P}$ 守恒。

应当说明, 时空平移变换的数学表示比较简单。因为时空平移只改变时空坐标，通过时空坐标的改变来影响波函数，不改变波函数的张量性质即粒子的内禀性质，所以时空平移变换是不涉及内禀自由度的算子。

### 2.3.3 空间反射不变性与宇称守恒

如果物理系统在真空背景的 $\vec{r}$ 和 $-\vec{r}$ 两点的性质一样，则说它具有空间反射不变性或对称性。如果对坐标系进行反射变换 $\vec{e}_i \to -\vec{e}_i$, 则右手坐标系变成左手坐标系。因此，具有反射对称性的系统，在左手系和右手系中的行为是一样的。

空间反射变换 $\hat{P}_\pi$(又称宇称变换) 的描述及性质：

(1) 坐标的变换

$$\vec{r} \xrightarrow{\hat{P}_\pi} -\vec{r}, t \xrightarrow{\hat{P}_\pi} t \tag{2-68a}$$

(2) 波 (标量) 函数的变换

$$\psi(\vec{r}) \to \hat{P}_\pi\psi(\vec{r}) = \psi(-\vec{r}) \tag{2-68b}$$

(3) 空间反射变换算符的表示是离散的变换，无微分表示；

(4) 力学量算符的变换：

$$\begin{aligned}
&\text{极矢量算符}\hat{P}_\pi\hat{\vec{P}}\hat{P}_\pi^{-1} = -\hat{\vec{P}}\\
&\text{轴矢算符}\hat{P}_\pi\hat{\vec{A}}\hat{P}_\pi^{-1} = \hat{\vec{A}}\\
&\text{标量算符}\hat{P}_\pi\hat{S}\hat{P}_\pi^{-1} = \hat{S}\\
&\text{赝标量算符}\hat{P}_\pi\hat{S}_P\hat{P}_\pi^{-1} = -\hat{S}_P
\end{aligned} \tag{2-68c}$$

(5) 空间反射变换群是离散的二元素的有限群, 又称宇称变换群 $\{I, \hat{P}_\pi\}$；

(6) 空间反射不变性导致宇称守恒。

系统 $\hat{H}$ 的空间反射不变性表示为

$$[\hat{P}_\pi, \hat{H}] = 0 \tag{2-69}$$

表明 $\hat{H}$ 是标量标符。因为

$$\hat{P}_\pi\hat{P}_\pi\psi(\vec{r}) = \hat{P}_\pi\psi(-\vec{r}) = \psi(\vec{r})$$

故

$$\hat{P}_\pi^2 = I, \quad \hat{P}_\pi^{-1} = \hat{P}_\pi \tag{2-70}$$

由

$$[\hat{P}_\pi\psi(\vec{r})]^+ = \hat{P}_\pi^+\psi^*(\vec{r}) = \psi^*(-\vec{r}) = \hat{P}_\pi\psi^*(\vec{r}) \tag{2-71a}$$

可知宇称算符 $\hat{P}_\pi$ 是 Hermite 的, 幺正的

$$\hat{P}_\pi^+ = \hat{P}_\pi = \hat{P}_\pi^{-1} \tag{2-71b}$$

由于宇称变换群只有两个元素 $\{I, \hat{P}_\pi\}$，它作用于函数空间只能生成二维空间 $\{\psi(\vec{r}), \hat{P}_\pi\psi(\vec{r})\}$，设 $\hat{P}_\pi$ 的本征态为 $\psi_\pm(r)$，即

$$\hat{P}_\pi\psi_\pm = P_\pm\psi_\pm, \quad \hat{P}_\pi^2\psi_\pm = P_\pm^2\psi_\pm = 1 \tag{2-72a}$$

$$P_\pm^2 = 1 \to P_\pm = \pm 1 \tag{2-72b}$$

一般的态 $\psi(\vec{r})$ 总可以写成

$$\psi(\vec{r}) = c_+\psi_+ + c_-\psi_- \tag{2-73a}$$

$$\psi_{\pm}=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi(\vec{r})\pm\psi(-\vec{r})] \tag{2-73b}$$

称 $\psi_+$ 为正宇称态，$\psi_-$ 为负宇称态。

因 $\hat{H}$ 与 $\hat{P}_\pi$ 对易，$\hat{H}$ 的本征态应当有确定的宇称。对中心力场中的粒子运动，宇称与 $l$ 有关，$l$ 的奇偶性与宇称的奇偶性一致：$l$=奇 $\to$ 奇宇称，$l$=偶 $\to$ 偶宇称，这是因为

$$\begin{aligned}\psi(\vec{r})&=R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)\\ \psi(-\vec{r})&=R_{nl}(r)Y_{lm}(-\theta,\varphi+\pi)\\ &=(-1)^lR_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)=(-1)^l\psi(\vec{r})\end{aligned} \tag{2-74}$$

因为宇称变换一般要改变张量，从而改变粒子的内禀量子态，因此对于有内禀量子数的粒子，宇称变换还必须包括作用于内禀空间的算子。本节只讨论无自旋的标量粒子，宇称算子的内禀部分为恒元 $I$，因此只剩下作用于外部空间的算子。

$\hat{H}$ 包含破坏空间反射对称性的项目的例子：自旋沿动量的投影 (螺旋性) 算符在宇称变换下改变符号

$$\hat{P}_\pi\vec{P}\cdot\hat{\vec{\sigma}}\hat{P}_\pi^{-1}\to-\vec{P}\cdot\hat{\vec{\sigma}} \tag{2-75}$$

因此, 如 $\hat{H}$ 中包含螺旋性算符 $\vec{P}\cdot\vec{\sigma}$, 则 $\hat{H}$ 的空间反射对称性破坏, 宇称不守恒; 如粒子物理中的弱相互作用项包含中微子的螺旋性算符, 宇称不守恒。总之, 由于 $[\hat{P}_\pi,\vec{P}\cdot\vec{\sigma}]\neq0$, 宇称守恒与螺旋性守恒矛盾, 在弱相互作用中, 中微子螺旋性守恒, 故宇称不守恒。

### 2.3.4　时间反演不变性

如果一个系统向未来演化的规律与向过去演化的规律一样，或者说演化过程可逆，就说它具有时间反演不变性和对称性。时间反演的对称性和不变性, 是真空背景在过去、现在和将来的属性的不变性和它对物理系统影响的同一性的表现。

时间反演变换 $\hat{T}$ 的描述及性质：

(1) 坐标的变换

$$t\xrightarrow{\hat{T}}-t,\vec{r}\xrightarrow{\hat{T}}\vec{r} \tag{2-76a}$$

(2) 波函数的变换：

$$\text{实函数}\psi(t)\xrightarrow{\hat{T}}\psi(-t)$$

$$\text{复函数}\psi(t)\xrightarrow{\hat{T}}\psi^*(-t)$$

$$\hat{T}\psi(t)=\psi^*(-t) \tag{2-76b}$$

(3) 时间反演变换算符构成的变换群是离散的二元素的有限群$\{\hat{T},I\}$；

(4) 力学量算符的变换：

$$\text{空间矢量算符}\vec{r} \to \vec{r}$$

$$\text{动量 (流) 算符}\hat{T}\hat{\vec{P}}\hat{T}^{-1} \to -\hat{\vec{P}} \tag{2-76c}$$

$$\text{角动量 (流) 算符}\hat{T}\hat{\vec{l}}\hat{T}^{-1} \to -\hat{\vec{l}}$$

系统 $\hat{H}$ 的时间反演不变性表示为

$$[\hat{T}, \hat{H}] = 0 \tag{2-77}$$

破坏时间反演不变性的例子：自旋磁矩在磁场中的 Zeeman 能量算符在时间反演变换下要改变符号,

$$\hat{T}\vec{B} \cdot \vec{\sigma}\hat{T}^{-1} \to -\vec{B} \cdot \vec{\sigma} \tag{2-78}$$

对带自旋磁矩的系统, 外磁场使其时间反演对称性破坏, 磁矩取向不同的态的能量不同, 不再简并；

(5) 时间反演变换算符是反幺正的, 不导致物理守恒定律。

Schroedinger 方程的时间反演不变性表明，$\psi$ 与 $\hat{T}\psi$ 都满足同一 Schroedinger 方程，即

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi, \quad \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\hat{T}\psi) = H(\hat{T}\psi) \tag{2-79}$$

由式 (2-77) 和式 (2-79) 可得

$$\hat{T}\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}\right) = \hat{T}H\hat{T}^{-1}\hat{T}\psi \tag{2-80a}$$

$$\hat{T}\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}T^{-1}\right)(\hat{T}\psi) = H(\hat{T}\psi) \tag{2-80b}$$

比较 Schroedinger 方程 (2-79) 第二式和式 (2-80b), 可得

$$\hat{T}\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\hat{T}^{-1} = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t},$$

考虑变换式 (2-76a) 后, 进而有

$$\hat{T}(\mathrm{i}\hbar)\hat{T}^{-1}\hat{T}\frac{\partial}{\partial t}T^{-1} = \hat{T}(\mathrm{i}\hbar)\hat{T}^{-1}\left(-\frac{\partial}{\partial t}\right) = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t} \tag{2-81a}$$

$$\hat{T}(\mathrm{i}\hbar)\hat{T}^{-1} = -\mathrm{i}\hbar = (\mathrm{i}\hbar)^* \tag{2-81b}$$

即在时间反演变换下, 对普通数应取复共轭, 从而证明了式 (2-76b) 的正确性。时间反演后的 Schroedinger 方程 (2-79) 第二式变为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi^*(-t)}{\partial t} = H\psi^*(-t) \tag{2-82a}$$

$$-\,\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi^*(\tau)}{\partial\tau}=H\psi^*(\tau),\quad \tau=-t \tag{2-82b}$$

刚好是原方程的复共轭方程。

现证明 $\hat{T}$ 不是幺正算子而是反幺正算子。

$$\hat{T}\psi=\hat{T}(c_1\psi_1+c_2\psi_2)=c_1{}^*\hat{T}\psi_1+c_2^*\hat{T}\psi_2 \tag{2-83}$$

$$\langle\varPhi|\hat{T}^+\hat{T}|\psi\rangle=\langle\hat{T}\varPhi|\hat{T}\psi\rangle=\langle\varPhi^*|\psi^*\rangle\neq\langle\varPhi|\psi\rangle \tag{2-84a}$$

因此

$$\hat{T}^+\hat{T}\neq 1,\cdots,\hat{T}^+\neq\hat{T}^{-1} \tag{2-84b}$$

反幺正性来自式 (2-83)。但是

$$\hat{T}^2\psi(t)=\hat{T}\hat{T}\psi(t)=\hat{T}^*\psi(-t)=\psi(t)\rightarrow\hat{T}^2=1\rightarrow\hat{T}^{-1}=\hat{T} \tag{2-85}$$

因此，$\hat{T}$ 的本征值为 $\pm1$。

反幺正算子不产生可观测量，但其本征值 $\pm1$ 可以用来对状态进行分类。

因为时间反演变换涉及内禀量子态的改变 (如复的波函数要变为其复共轭)，故对于具有内禀量子数的粒子，时间反演变换还应当包含作用于内禀空间的算子。这里的复数波函数，可看作某种内禀自由度。

## 2.4　全同粒子系统的置换对称性与统计性守恒

### 2.4.1　全同粒子

全同粒子是指内部量子数 (自旋磁量子数除外, 因为它涉及对外部空间取向) 相同的粒子，如电子、质子、中子等。对于同一种原子、分子，如果内部电子有激发，则可以根据不同的内部电子的量子数及相应的不同光谱区分它们，因而不是全同粒子。两个粒子可区分的条件是有一个内部特征不同。如果粒子的内部特征都一样，它们就不能区分。

全同粒子的概念是一个微观的概念。对于宏观粒子，粒子不可区分只是一个认识论的概念。人们看不出 (测不出) 两个粒子的微小差别，而实际上是有差别的。“世界上没有两片完全相同的树叶”，宏观粒子是不可能全同的。

而微观粒子的不可区分性则是有物理效应的客观属性 (不是主观认识论的概念)，是可以探测其物理效应 (统计性) 的物理属性 [6]。

### 2.4.2 置换对称性

1. 先考虑对换

对于 $A$ 个全同粒子组成的系统，它的状态波函数是所有粒子的所有坐标的函数

$$\psi = \psi(x_1, x_2, \cdots, x_i, \cdots, x_j, \cdots, x_A) \tag{2-86}$$

这里的坐标 $\{x_i\}$ 包括粒子的空间坐标和自旋、同位旋等内部坐标。设 $\hat{P}_{ij}$ 是一对坐标 $(x_i, x_j)$ 的对换算符, 其 $\hat{P}_{ij}$ 作用如下。

(1) 对坐标的变换：

$$\hat{P}_{ij}(x_i, x_j) = (x_j, x_i) \tag{2-87}$$

(2) 对波函数的变换：

$$\hat{P}_{ij}\psi(x_1, x_2, \cdots, x_i, \cdots, x_j, \cdots, x_A) = \psi(x_1, x_2, \cdots, x_j, \cdots, x_i, \cdots, x_A)$$

因为

$$\begin{aligned}\hat{P}_{ij}^2\psi(x_1, x_2, \cdots, x_i, \cdots, x_j, \cdots, x_A) &= \hat{P}_{ij}\psi(x_1, x_2, \cdots, x_j, \cdots, x_i, \cdots, x_A) \\ &= \psi(x_1, x_2, \cdots, x_i, \cdots, x_j, \cdots, x_A)\end{aligned}$$

所以

$$\hat{P}_{ij}^2 = 1 \to \hat{P}_{ij}^{-1} = \hat{P}_{ij} \tag{2-88}$$

故 $\hat{P}_{ij}$ 的本征值为 $\pm 1$。

现证明 $\hat{P}_{ij}$ 是幺正、Hermite 算符，证明如下：

$$\begin{aligned}&\langle \hat{P}_{ij}\psi(x_1, x_2, \cdots, x_i, \cdots, x_j, \cdots, x_A)|\hat{P}_{ij}\psi(x_1, x_2, \cdots, x_i, \cdots, x_j, \cdots, x_A)\rangle \\ =&\langle \psi(x_1, x_2, \cdots, x_i, \cdots, x_j, \cdots, x_A)|\hat{P}_{ij}^{+}\hat{P}_{ij}\psi(x_1, x_2, \cdots, x_i, \cdots, x_j, \cdots, x_A)\rangle \\ =&\langle \psi(x_1, x_2, \cdots, x_j, \cdots, x_i, \cdots, x_A)|\psi(x_1, x_2, \cdots, x_j, \cdots, x_i, \cdots, x_A)\rangle \\ =&\langle \psi(x_1, x_2, \cdots, x_i, \cdots, x_j, \cdots, x_A)|\psi(x_1, x_2, \cdots, x_i, \cdots, x_j, \cdots, x_A)\rangle\end{aligned} \tag{2-89a}$$

从第一式到第二式用到 Hermite 算符的定义, 从第三式到第四式用到积分哑变量的性质。从式 (2-89a) 得

$$\hat{P}_{ij}^{+}\hat{P}_{ij} = 1 \to \hat{P}_{ij}^{+} = \hat{P}_{ij}^{-1} = \hat{P}_{ij} \tag{2-89b}$$

所以 $\hat{P}_{ij}$ 是幺正的和 Hermite 的, 其本征值是可观测量。对于两个粒子的系统, 设 $\psi_\nu$ 是 $\hat{P}_{ij}$ 的本征函数，则

$$\hat{P}_{ij}\psi_\nu = p_\nu\psi_\nu, \quad p_\nu = \pm 1, \quad \nu = \pm 1 \tag{2-90}$$

两个粒子系统的波函数的对称性的确是可观测的。

2. 推广到置换

置换运算 $\hat{P}$ 是粒子坐标的一切可能的交换。对于全同粒子系统，交换粒子坐标不改变系统状态，其波函数对于任意两个粒子坐标的交换应当是同一个态，故对置换变换有

$$\hat{P}\psi_\nu = p\psi_\nu \tag{2-91}$$

因置换可以分解成若干对换的乘积，由对换的 Hermite 的和幺正的可证明 $\hat{P}$ 也是 Hermite 的和幺正的：

$$\hat{P} = \hat{P}^+ = \hat{P}^{-1} \tag{2-92}$$

故两次置换使波函数还原：

$$\hat{P}^2\psi_\nu = p^2\psi_\nu = \psi_\nu \to p^2 = 1 \to p = \pm 1 \tag{2-93}$$

即 $\psi_\nu$ 是 $\hat{P}$ 的本征态，其本征值 $p = \pm 1$。因此对全同粒子系统，波函数对交换粒子具有对称性，而且只有两种可能性。若 $\hat{P}$ 是奇置换算符, 则其本征值

$P = -1$, 波函数完全反对称——Fermi 系统

$P = +1$, 波函数完全对称——Bose 系统

3. 全同粒子系统的 $\hat{H}$ 的置换对称性

全同粒子系统的置换对称性也可以从 $\hat{H}$ 讨论。因为粒子是全同的，系统的性质不因交换粒子的坐标而改变，所以

$$\hat{P}\hat{H}\hat{P}^{-1} = \hat{H}, \quad [\hat{P}, \hat{H}] = 0 \tag{2-94}$$

对一般力学量算子有

$$\hat{P}\hat{O}\hat{P}^{-1} = \hat{O} \tag{2-95}$$

若 $\psi$ 是 $\hat{H}$ 的本征态

$$H\psi = E\psi \tag{2-96}$$

则由式 (2-94) 可证, $\hat{P}\psi$ 也是 $H$ 的本征态且其本征值仍为 $E$：

$$\hat{H}(\hat{P}\psi) = \hat{P}\hat{H}\psi = E(\hat{P}\psi) \tag{2-97}$$

对任一置换 $\hat{P}$, 总可以作线性组合使得 $\psi_\pm = [\psi \pm \hat{P}\psi]$ 对 $\hat{P}$ 具有

$$\hat{P}\psi_\pm = \hat{P}[\psi \pm \hat{P}\psi] = p_\pm\psi_\pm, \quad p_\pm = \pm 1 \tag{2-98}$$

由于置换是离散变换，其本征值只有两个，而系统的 $p$ 又守恒，因此，对于一个系统，$p_\pm$ 只能取一个值。若 $\hat{P}$ 是奇置换算符, 对费米子系统 $p_- = -1$，对玻色子系统 $p_+ = +1$，达到了同一结论。(上述 $\psi_\pm$ 只是某一置换算符 $\hat{P}$ 的本征函数, 并非全同粒子的波函数，后者要求对一切可能的置换对称化或反对称化, 见相关章节)。

$\hat{P}$和$\hat{P}_{ij}$ 是 Hermite 的可观测量的证据。对费米子系统，从 Pauli 效应观测到 $p = -1$ 及波函数的完全反对称性，从 Bose–Einstein 凝聚，观测到玻色子系统的 $p = +1$ 及波函数的完全对称性。

4. 运动方程协变性

从 $\hat{H}$ 的不变性可得出定态和时间有关的 Schroedinger 方程的协变性：$\psi$和$(P\psi)$ 满足同一方程

$$\hat{P}\hat{H}\hat{P}^{-1}\hat{P}\psi = \hat{H}(P\psi) = E(P\psi) \tag{2-99a}$$

$$\hat{P}\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi(x_1\cdots x_n)}{\partial t} = \hat{P}\hat{H}\psi(x_1\cdots x_n)$$

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial(P\psi)}{\partial t} = \hat{P}\hat{H}\hat{P}^{-1}\hat{P}\psi = \hat{H}(P\psi) \tag{2-99b}$$

### 2.4.3　置换群

$n$ 个粒子所有可能的置换构成一个群，称置换群 $S_n$。由全排列可知，$S_n$ 有 $n!$ 个元素 $S_n = \{\hat{S}_i|i = 1, 2, \cdots, n!\}$。一切置换都可以分解成若干对换的乘积。这种分解虽不唯一，但分解成的对换的个数的奇偶性不变。由于 $S_n$ 有 $n!$ 个不同的元素，一个多体系统的波函数通过 $S_n$ 作用可以生成 $n!$ 个不同状态 $\{\hat{S}_i\psi|i = 1, 2, \cdots, n!\}$，因此，这个状态空间是 $n!$ 维的，是 $S_n$ 群的正则表示空间。根据群表示论, 正则表示空间一定是可约的，即一定可以把这个空间分解成若干个不变子空间 (不可约子空间)。在 $S_n$ 的任意元素作用下，每个不变空间内的状态只在这个子空间内变换，这些不变子空间对应于置换群的不可约表示，它可以用如下的分布 $\{\nu_1, \nu_2, \nu_3, \cdots, \nu_n\}$ 来标记，而整数 $\nu_i$ 满足

$$\sum_{i=1}^{n}\nu_i = n \tag{2-100}$$

$$\nu_1 \geqslant \nu_2 \geqslant \nu_3 \cdots \geqslant \nu_n$$

其中，有一个不可约表示是 $\{n, 0, \cdots, 0\}$, 即

$$\nu_1 = n, \quad \nu_i = 0 \quad (i = 2, \cdots, n) \tag{2-101}$$

其表示空间是一维的，态矢对任意一对粒子的交换是完全对称的，它描述玻色子系统。另一个不可约表示是 $\{1, 1, \cdots, 1\}$，即

$$\nu_i = 1 \quad (i = 1, 2, \cdots, n) \tag{2-102}$$

其表示空间也是一维的，态矢对任意一对粒子的交换是完全反对称的，它描述费米子系统。在这两种表示之间还有许多其他不可约表示，对于全同粒子系统是非物理的。但若把多体系统的空间坐标波函数和自旋坐标波函数分开考虑，两种波函数的每一个都可以取互为共轭的中间型的不可约表示，两者相乘可以构成完全反对称表示。

### 2.4.4　分数统计

前面讨论对换 $\hat{P}_{ij}$ 时，认为两次对换 ($\hat{P}_{ij}^2$ 作用) 后，波函数恢复到原来的状态，这是从通常的物理空间的常识得出的认识。如果仔细分析就会对这个常识提出质疑。把两个粒子的交换看作一个物理过程，则需要把粒子 $i$ 从 $x_i$ 按一定路线移动到 $x_j$，而把粒子 $j$ 从 $x_j$ 按一定路线移动 $x_i$；再做一次交换，则粒子 $i$ 又从 $x_j$ 位置回到 $x_i$，而粒子 $j$ 从 $x_i$ 回到 $x_j$，这两个粒子的每一个都在 $x$ 空间走了一个回路 (图 2-1)。

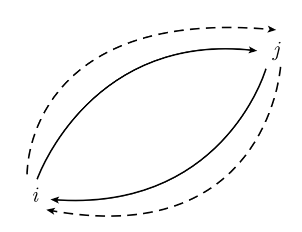



图 2-1　粒子 $(i,j)$ 坐标的交换在物理空间的实现 (两次交换后, 每个粒子分别在物理空间走了一圈)

设粒子 $i$ 的状态为 $\varphi_i$，粒子 $j$ 的状态为 $\varphi_j$，在一般情况下，波函数绕物理空间一圈时，应当产生一个相因子

$$\varphi_i \to \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_i}\varphi_i \tag{2-103}$$

在通常情况下，粒子的波函数绕物理空间一圈时，或者还原 (玻色子)，或者反号 (费米子)。因此

$$\alpha_i = n\pi, \quad n\text{为整数} \tag{2-104}$$

对一次交换时，相位为

$$\alpha_i/2 = (n/2)\pi$$

一般情况下，由于空间的拓扑性质变化了 (如有磁通通过), $\alpha_i$ 可以在 $[0, \pi]$ 之间取值。如果考虑其他一些限制 (如空间的拓扑守恒量可能的取值)，则 $\alpha_i$ 可取 $\pi$ 的分数：

$$\alpha_i = (q/p)\pi, \quad (p \geqslant q, \quad p,q\text{为整数}) \tag{2-105}$$

这时就出现所谓的分数统计，Bose 统计是 $q/p = 0$ 的整数统计，Fermi 统计是 $q/p = 1$ 的整数统计。

## 2.5　量子系统 Hamilton 量的动力学对称性

前面介绍的普遍的对称性，或者与时空背景的性质有关，或者与粒子的全同性

有关。还有一种对称性与系统的 Hamilton 量 $\hat{H}$ 的结构 (相互作用的结构) 有关。对不同的系统，$\hat{H}$ 的结构不同因而其对称性就不同。因为 $\hat{H}$ 决定系统的动力学性质，所以把与 $\hat{H}$ 的结构有关的对称性称为动力学对称性。动力学对称性通常是近似的, 与某种特定的量子运动形态有关 [8,9]。

### 2.5.1 动力学对称性的定义

设系统的 Hamilton 量 $\hat{H}$ 是某种动力学群 $G$ 的生成元 $g = \{X_i\}$ 的函数，则可以把生成元 $X_i$ 看作运动学变量，它们构成一个李代数 $g$, 其阶为 $n$, 秩为 $r$:

$$\hat{H} = \hat{H}(X_i), \quad [X_i, X_j] = \mathrm{i}C_{ij}^k X_k \tag{2-106}$$

$g$ 的 Cartan 形式为

$$g = \{H_i, E_{\pm\alpha} | i = 1, 2, \cdots, r; \alpha = 1, 2, \cdots, (n-r)/2\} \tag{2-107}$$

$H_i$ 为 Cartan 算子, 其个数 $r$ 代表李代数的秩，$E_{\pm\alpha}$ 为升降 (阶梯) 算子。

设 $G$ 包含一子群链

$$G \supset G_1 \supset G_2 \cdots \supset G_\nu \tag{2-108}$$

与该子群链相应的 Casimir 算子为

$$\hat{C}_s \quad \hat{C}_1 \quad \hat{C}_2 \quad \cdots \quad \hat{C}_\nu \tag{2-109}$$

从群链的 Casimir 算子集 $\{C_s, C_\nu\}$ 可以构成第二类完备的互易算子集

$$\text{CSCOII} = \{\hat{C}_s, \hat{C}_\nu, \hat{H}_i\} \tag{2-110}$$

$\hat{C}_s$ 为群 $G$ 的 Casimir 算子集, $\hat{C}_\nu$ 为子群链 $G_\nu$ 的 Casimir 算子集。CSCOII 的共同本征函数 $\psi_{n_s n_\nu n_i}$ 的本征方程及其相应的量子数为

$$\begin{pmatrix} \hat{C}_s \\ \hat{C}_\nu \\ \hat{H}_i \end{pmatrix} \psi_{n_s n_\nu n_i} = \begin{pmatrix} n_s \\ n_\nu \\ n_i \end{pmatrix} \psi_{n_s n_\nu n_i} \tag{2-111}$$

$\psi_{n_s n_\nu n_i}$ 完全给出了群 $G$ 的所有不可约表示的基矢。

动力学对称性的定义：如果 $\hat{H}$ 具有特殊的结构，使得 $\hat{H}$ 通过第二类完备的互易算子集 CSCOII 依赖于生成元$\{X_i\}$，即

$$\hat{H} = \hat{H}(X_i) = \hat{H}(\hat{C}_s(X_i), \hat{C}_\nu(X_i), \hat{H}_i(X_i)) \tag{2-112}$$

则说系统 $\hat{H}$ 具有以这种第二类完备的互易算子集 CSCOII 为标志的动力学对称性。

### 2.5.2 具有动力学对称性的系统的性质

(1) CSCOII 与 $\hat{H}$ 对易，是守恒量，与 $\hat{H}$ 有共同的本征函数和共同的本征方程：

$$\left[\begin{pmatrix} \hat{C}_s \\ \hat{C}_\nu \\ \hat{H}_i \end{pmatrix}, \hat{H}\right] = 0 \tag{2-113}$$

$$\hat{H}\psi_{n_s n_\nu n_i} = E(n_s, n_\nu, n_i)\psi_{n_s n_\nu n_i} \tag{2-114}$$

$$E(n_s, n_\nu, n_i) = H(n_s, n_\nu, n_i) \tag{2-115}$$

(2) 系统的本征值问题可用群论方法求解：

①$\hat{H}$ 的本征态就是 CSCOII 的本征态 $\psi_{n_s n_\nu n_i}$, 可用群论求得 (式 (2-111))。

②$\hat{H}$ 的本征能量 $E(n_s, n_\nu, n_i) = H(n_s, n_\nu, n_i)$ 是可用群论构造的已知函数，只需把式 (2-112) 中的 CSCOII 用相应的本征值代入即得本征能量, 见式 (2-115)。

### 2.5.3 例子

1. 外磁场中的磁转子

设磁转子的转动惯量为 $I$, 磁矩为 $\mu$, 外磁场为 $B$, 则 Hamilton 量为

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2I}\hat{J}^2 + \mu B \hat{J}_z \tag{2-116}$$

其动力学群为 SU(2), 其李代数为

$$g = \{\hat{H}_i, \hat{E}_{\pm\alpha}\} = \{\hat{J}_z, \hat{J}_\pm\}, \quad n = 3, \cdots, \quad r = 1 \tag{2-117}$$

群链为

$$\mathrm{SU}(2) \supset \mathrm{U}(1)$$

相应的 Casimir 算子为

$$\hat{J}^2, \quad \hat{J}_z$$

第二类完备互易算子集为

$$\mathrm{CSCOII} = \{\hat{J}^2, \hat{J}_z\} \tag{2-118}$$

它们的本征解为

$$\begin{pmatrix} \hat{J}^2 \\ \hat{J}_z \end{pmatrix} \psi_{JM} = \begin{pmatrix} J(J+1) \\ M \end{pmatrix} \psi_{JM} \tag{2-119}$$

$$\hat{H}\psi_{JM} = E(J, M)\psi_{JM} \tag{2-120}$$

$$E(J,M) = \frac{\hbar^2}{2I}J(J+1) + \mu BM \tag{2-121}$$

严格讲, 转子的波函数应为 $D$-函数, 为了简化问题, 省去了内禀角动量算子 $\hat{J}_3$ 及相应的量子数 $K$, 这时 $D$-函数约化为 $\psi_{JM}$。

2. SU(3) 夸克模型的动力学对称性

系统的 Hamilton 量为

$$\hat{H} = a\hat{C}_2 + b\hat{C}_3 + c\hat{Y} + d\hat{T}^2 + e\hat{T}_3 \tag{2-122}$$

其动力学群为 SU(3)，其李代数为

$$\text{su}(3) = \{\hat{Y}, \hat{T}_3, \hat{E}_{\pm\alpha} | \alpha = 1,2,3\} \tag{2-123}$$

群链为

$$\text{SU}(3) \supset \text{U}(2) \supset \text{SU}(2) \supset \text{U}(1) \tag{2-124}$$

相应的 Casimir 算子为

$$\hat{C}_2, \hat{C}_3 \quad \hat{Y} \quad \hat{T}^2 \quad \hat{T}_3$$

$\hat{Y}$ 为超荷, $\{\hat{T}, \hat{T}_3\}$ 为同位旋及其第三分量。第二类完备算子集为

$$\text{CSCOII} = \{\hat{C}_2, \hat{C}_3, \hat{Y}, \hat{T}^2, \hat{T}_3\} \tag{2-125}$$

CSCOII 的本征解为

$$\begin{pmatrix} \hat{C}_2 \\ \hat{C}_3 \\ \hat{Y} \\ \hat{T}^2 \\ \hat{T}_3 \end{pmatrix} \psi_{\lambda\mu YTM_T} = \begin{pmatrix} C_2(\lambda\mu) \\ C_3(\lambda\mu) \\ Y \\ T(T+1) \\ M_T \end{pmatrix} \psi_{\lambda\mu YTM_T} \tag{2-126}$$

$$\hat{H}\psi_{\lambda\mu YTM_T} = E(\lambda,\mu,Y,T,M_T)\psi_{\lambda\mu YTM_T} \tag{2-127}$$

$$E(\lambda,\mu,Y,T,M_T) = aC_2(\lambda\mu) + bC_3(\lambda\mu) + cY + dT(T+1) + eM_T \tag{2-128}$$

$$C_2(\lambda\mu) = \frac{2}{3}[(\lambda+3)(\lambda+\mu) + \mu^2] \tag{2-129}$$

$\hat{C}_3$ 为 su(3) 的三阶 Casimir 算子, 其本征值 $C_3(\lambda\mu)$ 比 $C_2(\lambda\mu)$ 复杂一些。

3. 氢原子: SO(4) 动力学群

氢原子的能级 $E_n$ 对角动量量子数 $l$ 简并，不同 $l$ 的状态具有相同的能量, 表明氢原子的 Hamilton 量 $\hat{H}$ 中应有一个比转动群 SO(3) 更大的对称群可以把不同 $l$ 的状态混合起来以形成能级 $E_n$ 对不同 $l$ 的状态简并。此外, 由于 $\hat{H}$ 的转动不变性, 该群应包含 SO(3) 群作为其子群, 使得能级 $E_n$ 对应的简并态子空间约化为 SO(3) 群的不变子空间, 从而使得 $(l, m)$ 是好量子数，而 $\hat{H}$ 应是这个大群的 Casimir 算子的函数，而角动量的 Casimir 算子受这个大群的 Casimir 算子的限制。比 SO(3) 群稍大的群是 SO(4) 群，因为这个 SO(4) 群与氢原子的 $\hat{H}$ 的结构有关，所以称为氢原子的动力学群。氢原子的 Hamilton 量为

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 - \frac{\kappa}{r} \quad (\kappa = \mathrm{e}^2) \tag{2-130}$$

显然 $\hat{H}$ 具有 SO(3) 对称性，即

$$[\hat{L}_i, \hat{H}] = 0, \quad \mathrm{so}(3) = \{\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z\} \tag{2-131}$$

除此之外，还可找到另一矢量算子

$$\hat{\vec{R}} = \frac{1}{2\mu\kappa}(\hat{p} \wedge \hat{L} - \hat{L} \wedge \hat{p}) - \frac{\vec{r}}{r} \tag{2-132}$$

可证

$$[\hat{\vec{R}}, \hat{H}] = 0, \quad \hat{R} \cdot \hat{L} = \hat{L} \cdot \hat{R} = 0 \tag{2-133}$$

$\hat{L}$ 和 $\hat{R}$ 一起构成 so(4) 代数，其对易关系为

$$[\hat{L}_\alpha, \hat{L}_\beta] = \mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{L}_r \tag{2-134a}$$

$$[\hat{L}_\alpha, \hat{R}_\beta] = \mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{R}_r \tag{2-134b}$$

$$[\hat{R}_\alpha, \hat{R}_\beta] = -\frac{2\hat{H}}{\mu\kappa^2}\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{L}_r \tag{2-134c}$$

$\{\hat{L}_\alpha\}$ 构成其子代数。

因 Hamilton 量 $\hat{H}$ 与 $\hat{L}$ 和 $\hat{R}$ 对易，故可看作常数算子，在 SO(4) 不可约表示中，其本征值为一个常数。令

$$\hat{A} = \sqrt{-\frac{\mu\kappa^2}{2\hat{H}}}\hat{R}, \quad [\hat{A}_\alpha, \hat{A}_\beta] = \mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{L}_r \tag{2-135}$$

$$\hat{I} = \frac{1}{2}(\hat{L} + \hat{A}), \quad \hat{K} = \frac{1}{2}(\hat{L} - \hat{A}) \tag{2-136}$$

则

$$[\hat{I}_\alpha, \hat{K}_\beta] = 0 \tag{2-137a}$$

$$[\hat{I}_\alpha, \hat{I}_\beta] = \mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{I}_r \tag{2-137b}$$

$$[\hat{K}_\alpha, \hat{K}_\beta] = \mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{K}_r \tag{2-137c}$$

$$\hat{I}^2 = \hat{K}^2 \tag{2-138}$$

故 $\hat{I}_\alpha$ 和 $\hat{K}_\beta$ 分别组成 $\mathrm{su}_I(2)$ 和 $\mathrm{su}_K(2)$ 代数，有如下的同构关系：$\mathrm{so}(4) \approx \mathrm{su}_I(2) \otimes \mathrm{su}_K(2)$, 它们的 Casimir 算子的本征值为

$$\hat{I}^2 \to I(I+1)\hbar^2, \quad \hat{K}^2 \to K(K+1)\hbar^2 \tag{2-139}$$

因 $I = \frac{1}{2}(L+A) = (L+A = \text{整数})/2$,

$$I = K = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \cdots, I\text{取整数或半整数值} \tag{2-140}$$

可以证明

$$\hat{A}^2 = -(\hat{L}^2 + \hbar^2) - \frac{\mu\kappa^2}{2\hat{H}} \tag{2-141}$$

因 $L \cdot R = R \cdot L = 0$, 式 (2-141) 可写成

$$(\hat{A} + \hat{L})^2 = 4\hat{I}^2 = -\frac{\mu\kappa^2}{2\hat{H}} - \hbar^2 \tag{2-142}$$

因而有

$$\hat{H} = \frac{\mu\kappa^2}{2}/(4\hat{I}^2 + \hbar^2) \tag{2-143}$$

可见 $\hat{H}$ 是 SO(4) 的 Casimir 算子 $\hat{I}^2 = \hat{K}^2$ 的函数, 很容易求得能量的本征值,

$$E(I) = \frac{-\mu\kappa^2}{2[4(I(I+1)+1)]\hbar^2} = -\frac{\mu\kappa^2}{2(2I+1)^2\hbar^2} = -\frac{\mu\kappa^2}{2n^2\hbar^2}, \quad n = 2I+1 \tag{2-144}$$

从 $\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{I}} + \hat{\vec{K}}$ 知 $\hat{L}$ 是两个长度相等的矢量 $\vec{I}$ 与 $\vec{K}$ 的矢量和，其取值为

$$\begin{aligned} l &= |I-K|, |I-K|+1, \cdots, (I+K) \\ &= 0, 1, 2, \cdots, 2I = n-1, \quad |\vec{I}| = |\vec{K}| \end{aligned} \tag{2-145}$$

由于 $\hat{L}$ 与 $\hat{H}$ 对易，$l$ 和 $m$ 也是守恒量，系统的状态可用 $(n, l, m)$ 标志，因此 $\psi = \psi_{nlm}$。由于 $\hat{H}$ 只是 SO(4) 的 Casimir 算子的函数并与 $\hat{L}$ 对易，故 $E_n$ 对 $lm$ 简并。由于 $L$ 是长度相同的 $\vec{I}$ 与 $\vec{K}$ 的矢量和，故 $L$ 的取值受 $I$ 限制, 有一个由 $I$ 规定的范围 $l = 0, 1, \cdots, 2I$。

从上述计算可见, 用动力学对称性理论和群论方法, 比较容易求得氢原子的能级, 但波函数的计算却比较复杂。径向波函数 $R_{nl}(r)$ 是 Casimir 算子 $\hat{I}^2=\hat{K}^2$ 的本征函数, 首先需要求得 $\hat{I}^2=\hat{K}^2$ 的用径向坐标及其微分的表示, 然后求解其本征方程。这是一个复杂的任务。

4. 三维各向同性谐振子的 SU(3) 对称性

三维各向同性谐振子的 Hamilton 量为

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2(x^2+y^2+z^2) \tag{2-146}$$

其能级也对角动量简并，表明它有一个比转动群 SO(3) 更大的对称群把不同 $l$ 的状态混合起来以形成同一能级对不同 $l$ 的状态简并。由于 $\hat{H}$ 的结构不同于氢原子，动力学群不是 SO(4) 而是 SU(3)。从下面的分析可以确认这点。

引进产生、消灭算子

$$\begin{aligned}a_i&=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x_i+\mathrm{i}\frac{\hat{p}_i}{\sqrt{m\omega\hbar}}\right)\\ a_i^+&=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x_i-\mathrm{i}\frac{\hat{p}_i}{\sqrt{m\omega\hbar}}\right)\quad(i=x,y,z)\end{aligned} \tag{2-147}$$

从 $[x_i,p_j]=\mathrm{i}\hbar\delta_{ij}$，可得

$$[a_i,a_j^+]=\delta_{ij},\quad [a_i^+,a_j^+]=[a_i,a_j]=0 \tag{2-148}$$

引进二阶张量算子

$$\hat{T}_{ij}=\frac{1}{2}(a_i^+a_j+a_ja_i^+) \tag{2-149}$$

易证

$$[\hat{T}_{ij},\hat{T}_{rs}]=\delta_{jr}\hat{T}_{is}-\delta_{is}\hat{T}_{jr} \tag{2-150}$$

这正是 U(3) 的代数，其 Cartan 算子为

$$\hat{H}_i=\hat{T}_{ii}=a_i^+a_i+\frac{1}{2},\quad i=x,y,z \tag{2-151}$$

而 $\hat{N}=\sum\limits_i\hat{H}_i=\sum\limits_i\left(\hat{n}_i+\dfrac{1}{2}\right)(\hat{n}_i=a_i^+a_i)$，是 U(3) 的一阶 Casimir 算子。

在二次量子化表象中 (见第 4 章)

$$\hat{H}=\left(\hat{n}_x+\hat{n}_y+\hat{n}_z+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega=\hat{N}\hbar\omega \tag{2-152}$$

可见系统的 Hamilton 量是 U(3) 一阶 Casimir 算子 $\hat{N}$ 的函数。其本征能量为

$$E_n = \left(n + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega, \quad n = n_x + n_y + n_z = \text{声子数} \tag{2-153}$$

由于各向同性谐振子的 $\hat{H}$ 只是 U(3)Casinir 算子的函数, 而 U(3) 群包含转动群 SO(3) 作为子群, 故 $E_n$ 对 $lm$ 简并。事实上, 从 $\hat{T}_{ij}$ 可以构成角动量算子

$$\begin{aligned}\hat{L}_x &= -\mathrm{i}\hbar(\hat{T}_{yz} - \hat{T}_{zy})\\ \hat{L}_y &= -\mathrm{i}\hbar(\hat{T}_{zx} - \hat{T}_{xz})\\ \hat{L}_z &= \mathrm{i}\hbar(\hat{T}_{xy} - \hat{T}_{yx})\end{aligned} \tag{2-154}$$

因此, 角动量算子组成转动 SO(3) 的生成元, 是 U(3) 的子群。从对易子

$$[\hat{L}_i, \hat{H}] = 0 \rightarrow [\hat{L}_i, \hat{N}] = 0 \tag{2-155}$$

可知角动量守恒, $\hat{N}$ 量子数确定的简并子空间由 $\hat{L}^2$ 的不可约表示空间组成。由于 $\hat{N}$ 量子数确定的简并子空间的维数必须等于它所包含的各种 $\hat{L}^2$ 的不可约表示空间的维数之和, 因此，$\hat{N}$ 的量子数 ($n$+3/2) 既限定了 $\hat{N}$ 的简并子空间的维数又限定了 $l$ 的取值范围：

$$n\text{为奇数},\ l = 1, 3, 5, \cdots, n; \quad n\text{为偶数},\ l = 0, 2, 4 \cdots, n \tag{2-156}$$

$E_n$ 对 $lm$ 的简并度为

$$M_n = \frac{1}{2}(n^2 + 3n + 2)。 \tag{2-157}$$

5. 原子核低能集体运动的SU(6)和高温超导体的SU(4)及SO(5)动力学对称性

1) 原子核集体运动的相互作用玻色子模型 (interacting boson model, IBM)[10,11]

研究表明，原子核的低能激发态集体运动的振动和转动能谱可以理解为与原子核的平均场的变化相对应的原子核的整体运动形态。因为平均场的变化会带动大量核子随之运动, 所以与平均场的变化相对应的原子核的运动是集体运动。把原子核看作液滴的宏观几何模型认为原子核的低能激发态集体运动由平均场几何形状的变化产生, 特别着重研究平均场的四极形变所导致的原子核的四极振动和轴对称转动。这种模型理论称为原子核集体运动的唯象几何模型。

从微观上理解, 原子核平均场的变化及其运动是由核子的某种相干激发产生, 与四极振动相对应的是角动量量子数为 2 的核子对的相干激发。集体运动量子数应当与核子对相干激发的量子数一致。因此, 可以从核子 — 空穴对或核子 — 核子对的相干激发算子出发理解原子核的集体运动, 而这些低能激发算子常常又近似地构成李代数, 所以把这种模型理论称为原子核集体运动的唯象代数模型。

原子核多体系统的低能集体运动激发态, 是量子多体系统低能激发态层展性质的典型。这种低能激发运动模式的对称性称为层展对称性。

从上述观点出发,Arima 和 Iachello 认为, 低能原子核的集体运动是由核子对的相干激发引起：角动量耦合成 0 和 2 的核子对的相互作用和相互转化, 造成原子核的集体振动和转动。由于角动量耦合成 0 和 2 的核子对象玻色子, 作为初级近似, 他们略去这些玻色子的费米子结构, 用理想的角动量为零的 $s$ 玻色子和角动量为 2 的 $d$ 玻色子来代表这些核子对并引进它们的产生和湮灭算符$\{s^+, s; d_\mu^+, d_\mu\}$, 满足下述对易关系

$$[s, s^+] = 1, \quad [d_\mu, d_\nu^+] = \delta_{\mu\nu} \tag{2-158}$$

$s$ 玻色子和 $d$ 玻色子彼此对易。由上述 6 种玻色子的产生和湮灭算符可以构成 36 个双线性的、保持 $s$ 和 $d$ 玻色子总数守恒 (这是费米子数守恒的要求) 的转动群 SO(3) 的不可约张量算子：

$$\begin{aligned}
G_0^{(0)}(ss) &= [s^+ \times s]_0^{(0)} \quad 1\text{个} \\
G_0^{(0)}(dd) &= [d^+ \times \tilde{d}]_0^{(0)} \quad 1\text{个} \\
G_\kappa^{(1)}(dd) &= [d^+ \times \tilde{d}]_\kappa^{(1)} \quad 3\text{个} \\
G_\kappa^{(2)}(dd) &= [d^+ \times \tilde{d}]_\kappa^{(2)} \quad 5\text{个} \\
G_\kappa^{(3)}(dd) &= [d^+ \times \tilde{d}]_\kappa^{(3)} \quad 7\text{个} \\
G_\kappa^{(4)}(dd) &= [d^+ \times \tilde{d}]_\kappa^{(4)} \quad 9\text{个} \\
G_\kappa^{(2)}(sd) &= [s^+ \times \tilde{d}]_\kappa^{(2)} \quad 5\text{个} \\
G_\kappa^{(2)}(ds) &= [d^+ \times s]_\kappa^{(2)} \quad 5\text{个}
\end{aligned} \tag{2-159}$$

其中，$\tilde{d}_\mu = (-1)^\mu d_{-\mu}$。

可以证明上述 36 个不可约张量算子构成 U(6) 的生成元, 满足 u(6) 代数。加上 $s$ 和 $d$ 玻色子总数守恒的约束条件

$$s^+ s + \sum_\mu d_\mu^+ d_\mu = N \tag{2-160}$$

独立的 35 个生成元构成 su(6) 代数。按假定, 上述 su(6) 代数生成的所有不等价不可约表示空间代表了所有 $s$ 和 $d$ 玻色子激发所生成的 Hilbert 空间, 自然包括了原子核低能集体运动子空间, 这些集体运动的物理子空间应当满足 $s$ 和 $d$ 玻色子数守恒和玻色子的全同性原理。由于原子集体运动具有确定的角动量 $(JM)$, 这些集体运动物理子空间应当具有转动群的 SO(3) 和 SO(2) 量子数。因此, 原子核集体运动子空间应当存在于按一些特定的不变子空间约化系列中, 这些约化系列的起点

是 SU(6), 而终点是 SO(3) 及其子群 SO(2) 。令人吃惊的是, 大自然通过群论的数学的严格性, 限定这样的约化的系列只有三种, 由下列三个群链来实现。

群链 I：SU(6) ⊃ U(5) ⊃ O(5) ⊃ SO(3) ⊃ SO(2)。

U(5) 的 25 个生成元是

$$\begin{aligned}
G_0^{(0)}(dd) &= [d^+ \times \tilde{d}]_0^{(0)} \quad 1\text{个} \\
G_\kappa^{(2)}(dd) &= [d^+ \times \tilde{d}]_\kappa^{(2)} \quad 5\text{个} \\
G_\kappa^{(4)}(dd) &= [d^+ \times \tilde{d}]_\kappa^{(4)} \quad 9\text{个} \\
G_\kappa^{(1)}(dd) &= [d^+ \times \tilde{d}]_\kappa^{(1)} \quad 3\text{个} \\
G_\kappa^{(3)}(dd) &= [d^+ \times \tilde{d}]_\kappa^{(3)} \quad 7\text{个}
\end{aligned} \tag{2-161}$$

O(5) 的 10 个生成元是

$$\begin{aligned}
G_\kappa^{(1)}(dd) &= [d^+ \times \tilde{d}]_\kappa^{(1)} \quad 3\text{个} \\
G_\kappa^{(3)}(dd) &= [d^+ \times \tilde{d}]_\kappa^{(3)} \quad 7\text{个}
\end{aligned}$$

SO(3) 的 3 个生成元是

$$G_\kappa^{(1)}(dd) = [d^+ \times \tilde{d}]_\kappa^{(1)} \quad 3\text{个}$$

SO(2) 的 1 个生成元是

$$G_0^{(1)}(dd) = [d^+ \times \tilde{d}]_0^{(1)} \quad 1\text{个}$$

与这一群链相应的 Casimir 算子是

$$\begin{aligned}
&C_1[\mathrm{U}(5)] = G_0^{(0)}(dd) = [d^+ \times \tilde{d}]_0^{(0)} = \vec{d}^+ \cdot \vec{d} = \hat{n}_d \\
&C_2[\mathrm{U}(5)] = \frac{4}{5}(\vec{d}^+ \cdot \vec{d})(\vec{d}^+ \cdot \vec{d}) + (\vec{d}^+ \cdot \vec{d}) \\
&C_2[\mathrm{O}(5)] = -\frac{1}{4}\sum_{\mu\nu}(-1)^{\mu+\nu}(d_\mu^+\tilde{d}_\nu - d_\nu^+\tilde{d}_\mu)(d_{-\mu}^+\tilde{d}_{-\nu} - d_{-\nu}^+\tilde{d}_{-\mu}) \\
&C_2[\mathrm{SO}(3)] = \vec{L} \cdot \vec{L}, L_\kappa = \sqrt{10}G_\kappa^{(1)}(dd)
\end{aligned} \tag{2-162}$$

对应的量子数是 $\{N, n_d, v, n_\Delta, L, M\}$, 其中，$N$ 是 SU(6) 的量子数, $v$ 是 O(5) 的量子数,$n_\Delta$ 是从 O(5) 向 SO(3) 约化所需的附加量子数。不可约基矢 (集体运动波函数) 为 $|N, n_d, v, n_\Delta, L, M\rangle$。

群链 II：SU(6) ⊃ U(3) ⊃ SO(3) ⊃ SO(2)。

U(3) 的 9 个生成元是

$$G_0^{(0)}(ss) + \sqrt{5}G_0^{(0)}(dd) = [s^+ \times s]_0^{(0)} + [d^+ \times \tilde{d}]_0^{(0)} \quad 1\text{个}$$

$$G_\kappa^{(1)}(dd) = [d^+ \times \tilde{d}]_\kappa^{(1)} \qquad 3个$$

$$Q_\kappa = G_\kappa^{(2)}(sd) + G_\kappa^{(2)}(ds) - \frac{\sqrt{7}}{2} \quad G_\kappa^{(2)}(dd) \qquad 5个$$

SO(3) 的 3 个生成元是

$$G_\kappa^{(1)}(dd) = [d^+ \times \tilde{d}]_\kappa^{(1)} \qquad 3个$$

SO(2) 的 1 个生成元是

$$G_0^{(1)}(dd) = [d^+ \times \tilde{d}]_0^{(1)} \qquad 1个 \tag{2-163}$$

与这一群链相应的 Casimir 算子是

$$C_2[U(3)] = \vec{Q} \cdot \vec{Q} + \frac{3}{8}\vec{L} \cdot \vec{L} \tag{2-164}$$

对应的量子数是 $\{N, \lambda, \mu, x(K), L, M\}$, 其中，$N$ 是 SU(6) 的量子数,$(\lambda, \mu)$ 是 U(3) 的量子数, $x(K)$ 是从 U(3) 向 SO(3) 约化所需的附加量子数。

不可约基矢 (集体运动波函数) 为 $|N, \lambda, \mu, x(K), L, M\rangle$, 代表一种特定的集体运动。

群链 III：SU(6) ⊃ O(6) ⊃ O(5) ⊃ SO(3) ⊃ SO(2)。

O(6) 的 15 个生成元是

$$\begin{aligned} &G_\kappa^{(1)}(dd) = [d^+ \times \tilde{d}]_\kappa^{(1)} \quad 3个 \\ &G_\kappa^{(3)}(dd) = [d^+ \times \tilde{d}]_\kappa^{(3)} \quad 7个 \\ &G_\kappa^{(2)}(sd) + G_\kappa^{(2)}(ds) \qquad 5个 \end{aligned}$$

O(5) 的 10 个生成元是

$$\begin{aligned} &G_\kappa^{(1)}(dd) = [d^+ \times \tilde{d}]_\kappa^{(1)} \quad 3个 \\ &G_\kappa^{(3)}(dd) = [d^+ \times \tilde{d}]_\kappa^{(3)} \quad 7个 \end{aligned}$$

SO(3) 的 3 个生成元是

$$G_\kappa^{(1)}(dd) = [d^+ \times \tilde{d}]_\kappa^{(1)} \quad 3个$$

SO(2) 的 1 个生成元是

$$G_0^{(1)}(dd) = [d^+ \times \tilde{d}]_0^{(1)} \quad 1个 \tag{2-165}$$

这一群链的相应的 Casimir 算子是

$$
\begin{aligned}
C_2[\mathrm{O}(6)] &= 2\sum_{\mu}(-1)^{\mu}(d_{\mu}^{+}s - s^{+}\tilde{d}_{\mu})(d_{-\mu}^{+}s - s^{+}\tilde{d}_{-\mu}) - C_2[\mathrm{O}(5)] \\
C_2[\mathrm{O}(5)] &= -\frac{1}{4}\sum_{\mu\nu}(-1)^{\mu+\nu}(d_{\mu}^{+}\tilde{d}_{\nu} - d_{\nu}^{+}\tilde{d}_{\mu})(d_{-\mu}^{+}\tilde{d}_{-\nu} - d_{-\nu}^{+}\tilde{d}_{-\mu})
\end{aligned} \tag{2-166}
$$

对应的量子数是 $\{N,\sigma,v,n_{\Delta},L,M\}$, 其中，$N$ 是 SU(6) 的量子数, $\sigma$ 是 O(6) 的量子数, $v$ 是 O(5) 的量子数, $n_{\Delta}$ 是从 O(5) 向 SO(3) 约化所需的附加量子数。不可约基矢 (集体运动波函数) 为 $|N,\sigma,v,n_{\Delta},L,M\rangle$。

上述 6 个 Casimir 算子都是 SO(3) 群的标量。$C_1[\mathrm{U}(5)]$ 是 $d$ 玻色子数算符, 其他 5 个 Casimir 算子穷尽了玻色子二体相互作用标量算符的一切可能形式。因此, 包含玻色子能量和二体相互作用的 Hamilton 量, 可写成它们的线性组合, 即

$$
\begin{aligned}
H_{\mathrm{IBM}} = E_0 &+ \varepsilon C_1[\mathrm{U}(5)] + \alpha C_2[\mathrm{U}(5)] + \beta C_2[\mathrm{O}(5)] \\
&+ \gamma C_2[\mathrm{O}(3)] + \delta C_2[\mathrm{U}(3)] + \eta C_2[\mathrm{O}(6)]
\end{aligned} \tag{2-167}
$$

由于三条群链的 Casimir 算子之间一般不对易, 它们的量子数不能同时确定，也就是说, 在一般情况下，上述三个群链对应的集体运动是混杂的。然而, 原子核物理实验表明在一定场合, 上述三条群链可分别单独实现。

(1) 满壳外有少数核子 (质子或中子) 的原子核, 其低能集体运动由第一条群链描述：

$$
H_{\mathrm{IBM}}^{\mathrm{I}} = E_0 + \varepsilon C_1[\mathrm{U}(5)] + \alpha C_2[\mathrm{U}(5)] + \beta C_2[\mathrm{O}(5)] + \gamma C_2[\mathrm{O}(3)] \tag{2-168}
$$

其本征能谱为

$$
E_{\mathrm{IBM}}^{\mathrm{I}} = E_0 + \varepsilon n_d + \alpha\frac{4}{5}n_d(n_d+1) + \beta\frac{1}{2}v(v+3) + \gamma L(L+1) \tag{2-169}
$$

集体运动本征波函数为

$$
|N,n_d,v,n_{\Delta},L,M\rangle \tag{2-170}
$$

代表原子核四极集体振动。

(2) 满壳外有较多核子 (质子或中子) 的原子核, 其低能集体运动由第二条群链描述：

$$
H_{\mathrm{IBM}}^{\mathrm{II}} = E_0 + \gamma C_2[\mathrm{O}(3)] + \delta C_2[\mathrm{U}(3)] \tag{2-171}
$$

其本征能谱为

$$
E_{\mathrm{IBM}}^{\mathrm{II}} = E_0 + \delta\frac{1}{2}(\lambda^2 + \mu^2 + \lambda\mu + 3\lambda + 3\mu) + \gamma L(L+1) \tag{2-172}
$$

集体运动本征波函数为

$$|N, \lambda, \mu, x(K), L, M\rangle \tag{2-173}$$

代表形变原子核的集体转动。

(3) 满壳内有少数空穴 (质子或中子空穴) 的原子核, 其低能集体运动由第三条群链描述：

$$H_{\rm IBM}^{\rm III} = E_0 + +\beta C_2[{\rm O}(5)] + \gamma C_2[{\rm O}(3)] + \eta C_2[{\rm O}(6)] \tag{2-174}$$

其本征能谱为

$$E_{\rm IBM}^{\rm III} = E_0 + \eta 2\sigma(\sigma+4) + \beta\frac{1}{2}v(v+3) + \gamma L(L+1) \tag{2-175}$$

集体运动本征波函数为

$$|N, \sigma, v, n_\Delta, L, M\rangle \tag{2-176}$$

代表原子核的较软的 $\gamma$-集体振动。

2) 高温超导体的 SU(4) 和 SO(5) 动力学对称性 [12,13]

近年来，有人提出高温超导可用 U(4)⊃SU(4) 动力学对称性来描述，它的三个群链为

| | | | |
|---|---|---|---|
| | (Ⅰ)SO(4) ⊗ U(1) | | 反铁磁相 (AF) |
| U(4) ⊃ SU(4) ⊃ | (Ⅱ)SO(5) | ⊃ SU$_s$(2) ⊗ U(1) | 自旋玻璃相 (SG) |
| | (Ⅲ)SU$_p$(2) × SU$_s$ | (2)　角动量和电荷守恒 | 超导相 (SC) |

分别描述高超导体的 (Ⅰ) 反铁磁相，(Ⅱ) 自旋玻璃相 (临界动力学对称性) 和 (Ⅲ) 超导相。

## 2.6 对称性与群论

### 2.6.1 对称性用对称群描述

研究物理系统的对称性必须引进对称变换，而对称变换的全体构成一个群，称对称群 [1−7]。这样，物理系统对称性的研究在数学上就变成一个群论问题。量子系统 Hamilton 量 $\hat{H}$ 的求解问题就可以借助群论方法加以解决。因此，群论是研究物理系统的对称性的最有力的数学工具。作为物理学工作者，最重要是把群论语言与物理内涵紧密联系起来。

### 2.6.2 连续的对称变换导致李群 —— 连续可微群

李群的发展最为完善，因而称为典型群。我们研究的 SU(2)、SU(3)、SU(4)，SO(3)、SO(4)、SO(5)，还有 Sp(6) 等, 都属于典型李群。

### 2.6.3 不连续的对称变换导致离散群

空间反射变换、时间反演变换、置换变换都属于离散变换，离散变换导致离散群。

### 2.6.4 空间群

晶体的平移群是一般空间平移变换群的离散子群, 而晶体的点群是 O(3) 群的离散子群。平移群和点群构成晶体点阵空间的空间群 (费德洛夫群)，它决定了自然界的晶体只能有 230 种结构。这再一次表明了时空和背景的对称性在一定程度上决定了自然界事物的某些普通而基本的属性。量子力学的对称性理论正是研究量子系统的外部和内部对称性, 与量子运动形态和守恒定律之间的联系的科学。这是一门形式优美严谨、内涵极其深刻的学问。

## 2.7 量子系统的对称性和量子对称运动模式

本章的内容表明，量子系统普遍地存在着对称性，而对称性又导致守恒定律。

1) 量子系统的对称性的物理来源

(1) 外部对称性来自物理系统赖以存在的背景。物理系统最普遍的背景是真空，而周期性点阵空间则是晶体系统存在的物理背景。来自真空背景的对称性导致普遍的守恒定律，而来自周期性点阵空间背景的对称性则决定晶体结构的类型。

(2) 内部对称性来自物理系统的相互作用，导致动力学对称性。

2) 量子系统对称性的物理后果

(1) 从运动学的角度说，物理系统的对称性使得其对称性代数的生成元成为量子力学运动学变量，具有一定的代数结构，并产生物理系统的量子对称运动模式。

(2) 从动力学角度说，作为运动学变量的对称性代数生成元进入系统的 Hamilton 量，使得量子系统的动力学成为对称性代数系统的动力学，并按对称性代数动力学的方式确定量子系统的守恒量子数，以及波函数及其时间演化。

总之，量子系统的对称性，导致量子系统的对称运动模式，并按照对称性代数动力学方式确定守恒定律和动力学时间演化。量子系统对称运动模式的时间演化可用代数动力学描述。

在本书第二篇第 14 章“量子对称运动模式和代数动力学”中，将详细讨论这一问题。

## 参 考 文 献

[1] Weyl H. The Theory of Groups and Quantum Mechanics. New York：Dover, 1950.

[2] 顾莱纳 W, 缪勒 B. 量子力学: 对称性. 钱裕昆, 等译. 北京: 北京大学出版社, 2002.
[3] Wybourne B G. Classical Groups for Physicists. New York：Wiley, 1974.
[4] Chen J Q. Group Representation Theory for Physicists. Singapore：World Scientific, 1989.
[5] 陈金全. 群表示论的新途径. 上海：上海科学技术出版社, 1984.
[6] 马中骐. 物理学中的群论. 北京：科学出版社, 1998.
[7] 韩其智, 孙洪洲. 群论. 北京：北京大学出版社, 1987.
[8] Bohm A, Ne′eman Y, Barut A. Dynamical Groups and Spectrum Generating Algebras. Singapore: World Scientific, 1988.
[9] 王顺金. 人造量子系统的理论研究与代数动力学. 物理学进展, 1999, 19 (4): 331–373.
[10] Arima A, Iachello A. Ann Phys, 1976, 99: 253; Ann phys, 1978, 111: 201; Ann phys, 1978, 115: 325; Ann phys, 1979, 123: 468.
[11] 徐躬耦，杨亚天. 原子核理论 (核结构与核衰变部分). 北京：高等教育出版社，1987.
[12] Zhang S C. Science, 1997, 275: 1089.
[13] Wu L A, Guidry M, Sun Y, et al. arXiv: cond-mat/9905436, 9903150; Sun Y, Guidry M, Wu L, et al. arXiv: cond-mat/9912072.

# 第 3 章　量子多体理论( I ): 平均场理论

平均场理论是量子多体理论的零级近似理论，是进一步近似的出发点，也是最重要、最流行的量子多体理论, 因而成为量子多体理论的基础。平均场理论所包含的物理概念是量子多体理论的精华，是微观多体世界的最重要的物理属性的深刻反映。

## 3.1　量子力学多体问题

### 3.1.1　量子多体系统与量子多体问题

量子力学问题，绝大多数是量子多体系统的问题[1]，包括：①量子多体系统结构的研究，如原子、分子及原子核的结构，固体的结构及其电磁性质; ②量子多体系统碰撞与反应过程的研究，如原子、分子碰撞、原子核碰撞与反应截面的计算; ③量子多体系统衰变性质的研究，如原子、分子的发光，原子核的 $\alpha$、$\beta$、$\gamma$ 衰变与裂变等。量子多体系统的分类如下。

(1) 按照粒子的种类，多体系统分为：①费米子系统，如原子，分子中的电子系统，原子核系统，固体中的电子系统；②玻色子系统，如固体中的声子系统，光子系统；③费米子–玻色子混杂系统，如固体中电子–声子系统，激光与原子相互作用系统等。

(2) 按照微观粒子相互作用或耦合的强弱，多体系统可分为：①弱作用或弱耦合系统，如电磁作用与弱作用系统；②强作用或强耦合系统，如原子核系统，电子强耦合系统。

非相对论量子多体理论的任务是从多体相互作用和多体 Schroedinger 方程出发，计算多体系统的各种性质。

### 3.1.2　量子多体理论: 微观理论和等效理论

量子多体理论可分为从第一原理出发的微观多体理论和从等效相互作用出发的唯象或半唯象等效理论。

由于量子多体问题的复杂性，除少数量子多体问题 (如氢原子问题) 外，绝大多数量子多体系统很难从第一原理出发求解，合理的近似成为求解量子多体问题的关键，其中平均场理论是最成功的近似理论，成为处理量子多体问题的其他各种理论的出发点，也是建立各种等效相互作用理论的基础。

### 3.1.3　微扰理论和非微扰理论

平均场理论本身就是非微扰的。在平均场近似的基础，可以得到多体系统零级近似的 Hamilton 量 $\hat{H}_0$，这时系统的 Hamilton 量 $\hat{H}$ 可以写成

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V_{\text{res}} \tag{3-1}$$

平均场近似是最简单的非微扰理论，它通过自洽场方法把相互作用的主要部分包括到平均场之中，使得剩余相互作用 $V_{\text{res}}$ 变得比较微弱，因而可以用微扰论方法求解。基于平均场的微扰论在原子物理和原子核物理的某些问题的处理中相当成功。

但是, 对于另一些问题，特别是核物理中的问题和固体物理中的强关联问题，对 $V_{\text{res}}$ 做微扰处理仍不能得到好的结果，这就需要发展处理剩余相互作用 $V_{\text{res}}$ 的非微扰理论，这正是第 4、5 章要研究的问题。

## 3.2　平均场理论：最简单的非微扰理论和处理多体问题的出发点

### 3.2.1　平均场理论的基本思想

存在相互作用的多粒子系统，每个粒子都受到周围其他粒子的作用，这些周围粒子的相互作用的叠加并对其粒子密度分布 (粒子云) 的平均，在零级近似下，将产生一个平均势场。由于对粒子密度平均时其他粒子坐标已经被积分掉，使得平均势场成为一个单体算符，只依赖于受作用的这个粒子的坐标。但平均势场不同于外界施加的外场，而是其他粒子对这个粒子相互作用叠加和平均的结果，代表多粒子系统中其余粒子对这个粒子的集体平均影响。由于所有粒子都在运动，代表它们平均影响的平均场一般随时间变化，但在定态极限下，它是静态的。对于全同粒子系统，特别是费米子系统，由于多体系统波函数或密度矩阵中存在着交换项，平均场相应地也包含一个非定域的交换项，它与动量相关势场等效。对于带自旋的粒子，平均场还包含自旋–轨道力 (在相对论情况下，还包含张量力)[2,3]。

对于二体相互作用的多体系统，Hamilton 量 $\hat{H}$ 包含一体算符的动能项 (只依赖一个粒子的坐标的微分) 和二体算符的相互作用项 (依赖两个粒子的坐标)。而平均场是单体算符，它虽然可以包含二体相互作用中主要的平均效应，但不能完全代替二体相互作用项，只能是对二体相互作用的单体近似。这些不能用平均场概括的二体相互作用，称为剩余相互作用 $V_{\text{res}}$。因此，考虑了平均场以后，系统 Hamilton 量中有一个由平均场单体算子组成的 Hamilton 量 $\hat{H}_0$(又称独立粒子近似下的 Hamilton 量)，还有一个平均场不能包括的二体剩余相互作用 $V_{\text{res}}$。系统总的

Hamilton 量应为二者之和，$\hat{H} = \hat{H}_0 + V_{\text{res}}$。$\hat{H}_0$ 产生平均场支配下的系统中每个粒子的独立粒子运动，类似于外场作用下产生的独立粒子运动；而剩余相互作用 $V_{\text{res}}$ 则破坏独立粒子运动, 把这些独立粒子运动耦合起来，产生各种各样的多体关联，以至于集体运动。

多体系统中粒子–粒子相互作用产生平均场的过程, 对于定态问题, 是一个非线性的自洽反馈的过程。具有确定量子态的各个粒子对某个粒子相互作用的叠加并对这些粒子的密度分布求平均后，产生了一个单体平均场。这个单体的平均场反过来又产生出各个粒子的确定的量子运动，即所有粒子的量子状态决定了平均场，而平均场又产生出各个粒子的量子运动，这样就形成一个非线性的反馈过程。对于定态, 这个过程必须达到自洽：产生平均场 $U$ 的各个粒子的量子态 $\psi_\alpha$ 应当是平均场产生的各个粒子的量子态，产生各个粒子量子态的平均场应当是各个粒子的量子态生成的平均场，即 $\psi_\alpha \rightarrow U \rightarrow \psi_\alpha$ 或 $U \rightarrow \psi_\alpha \rightarrow U$。

总之，平均场理论的基本思想是：①多体系统各粒子对某一粒子相互作用的叠加和平均，产生一个平均场；②这个平均是单体算符，包括非定域 (动量有关) 项和自旋轨道力甚至张量力；③产生平均场的过程是一个非线性反馈的过程，对定态问题, 还要求自洽; ④平均场是对多体系统相互作用的非微扰的零级近似，对多体系统的正确描述应当是平均场加剩余相互作用；⑤平均场产生多体系统中各个粒子的独立粒子运动，而剩余相互作用要破坏这种独立粒子运动，引起量子态跃迁，产生粒子之间的多体关联，导致集团运动、集体运动甚至量子无规运动。

### 3.2.2 平均场近似：时间有关的 Hartree-Fock 理论 (TDHF) 与 Hartree-Fock 理论 (HF)

如上所述，在平均场近似下，剩余相互作用被略去，系统的 Hamilton 量成为单体算符，各个粒子在平均场中彼此独立地运动, 但粒子之间通过自洽平均场相互联系, 互通信息。因此, 自洽平均场体现了多体系统粒子之间的整体关联和整体相互影响。平均场近似又称独立粒子近似。但与外场中的独立粒子运动不同，平均场近似下的独立粒子运动的量子态和产生这些量子态的平均场必须有互为因果的反馈关系。自洽平均场不断地从所有粒子运动中获得信息, 因此，它随多粒子系统中各个粒子的量子态的变化而变化的，不像外场那样不受粒子运动的影响, 因而是固定不变的。

1. 时间有关的平均场近似 (TDHF)

在时间有关的平均场近似下，每个粒子有随时间变化的独立的量子态, 因此可以假定系统中 $A$ 个粒子占据 $A$ 个时间有关的单粒子态 $\varphi_\alpha(\vec{r}, t)$，满足正交归一化

条件

$$\langle\varphi_\alpha|\varphi_\beta\rangle = \delta_{\alpha\beta} \tag{3-2}$$

对于费米子系统，多体系统的波函数应当是反对称化的。在独立粒子近似下，它应当是 $A$ 个粒子的波函数的乘积的完全反对称化组合，即应是一个 Slater 行列式

$$\begin{aligned}\Phi_A(1\cdots A) &= \frac{1}{\sqrt{A!}}\sum_p(-1)^p P\left[\varphi_{\alpha_1}(1)\varphi_{\alpha_2}(2)\cdots\varphi_{\alpha_A}(A)\right]\\ &= \frac{1}{\sqrt{A!}}\begin{vmatrix}\varphi_{\alpha_1}(1) & \varphi_{\alpha_1}(2) & \cdots & \varphi_{\alpha_1} & (A)\\ \varphi_{\alpha_2}(1) & \varphi_{\alpha_2}(2) & \cdots & \varphi_{\alpha_2} & (A)\\ \vdots & \vdots & & \vdots & \\ \varphi_{\alpha_A}(1) & \varphi_{\alpha_A}(2) & \cdots & \varphi_{\alpha_A} & (A)\end{vmatrix}\end{aligned} \tag{3-3}$$

如果系统的总角动量不为零，则在平均理论中还要考虑上述波函数对具有确定角动量的量子态的投影运算 (角动量投影的平均场理论)。

二粒子系统的 Slater 行列式波函数为

$$\Phi_2(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_1(1)\varphi_2(2) - \varphi_1(2)\varphi_2(1)]$$

对 $A$ 个全同粒子的费米子系统, 在独立粒子近似 (平均场近似) 下，时间有关的 Schroedinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi_A}{\partial t} = \hat{H}\psi_A \tag{3-4}$$

应当限制在独立粒子近似波函数 $\Phi_A$ 这个子空间内求解：

$$\psi_A \cong \Phi_A \tag{3-5}$$

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Phi_A}{\partial t} \cong \hat{H}\Phi_A \tag{3-6}$$

在二体相互作用情况

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{A}\frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}^{A}V(ij) \tag{3-7}$$

时间有关 Schroedinger 方程的推导如下。

(1) 严格解：时间有关的 Schroedinger 方程 (3-4) 可用作用量变分极小原理得到。定义作用量

$$I[\psi_A] = \int \mathrm{d}t\langle\psi_A|\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}|\psi_A\rangle = \int \psi^*{}_A\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}\right)\psi_A\mathrm{d}x\mathrm{d}t$$

$x$ 代表所有粒子的坐标。考虑 $\psi_A^*$ 在整个 Hilbert 空间的变分, 由作用量变分极小得

$$\delta_{\psi_A^*} I[\psi_A] = 0 \tag{3-8}$$

$$\int \delta\psi_A^* \left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}\right)\psi_A \mathrm{d}x\mathrm{d}t = 0$$

由于 $\delta\psi_A^*$ 任意，被积函数必为零, 因此得时间有关的 Schroedinger 方程

$$\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}\right)\psi_A = 0 \tag{3-9}$$

(2) 近似解：若把变分限制在独立粒子近似确定的子空间——Slater 行列式 $\varPhi_A$ 内进行, 把对 $\varPhi_A$ 的变分变成对 $\varphi_\alpha$ 的变分, 则得到 TDHF 方程。步骤如下。

限制变分子空间到 $\varPhi_A$

$$\psi_A \cong \varPhi_A(1\cdots A) \tag{3-10}$$

在这个子空间计算作用量

$$\begin{aligned} I[\varPhi_A] &= \int \mathrm{d}t \Big\langle \varPhi_A | \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} | \varPhi_A \Big\rangle \\ &= \int \mathrm{d}t \Bigg\{ \sum_\alpha \int \varphi_\alpha^*(1t)\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi_\alpha(1t)\mathrm{d}1 - \sum_\alpha \int \varphi_{\alpha'}^*(1t)\frac{\hat{p}_1^2}{2m}\varphi_{\alpha'}(1t)\mathrm{d}1 \\ &\quad - \frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta}\int \varphi_{\alpha'}^*(1t)\varphi_{\beta'}^*(2t)V(12)\left[\varphi_\alpha(1t)\varphi_{\beta'}(2t) - \varphi_\alpha(2t)\varphi_{\beta'}(1t)\right]\mathrm{d}1\mathrm{d}2 \Bigg\} \end{aligned} \tag{3-11}$$

其中，$\mathrm{d}i = \mathrm{d}x_i$, $(it) = (x_i, t)$。在这个子空间对作用量变分 (对 $\varPhi_A$ 的变分变成对 $\varphi_\alpha$ 的变分)

$$\delta_{\varphi_\alpha^*} I[\varPhi_A] = 0 \tag{3-12}$$

$$\begin{aligned} &\int \delta\varphi_\alpha^*(1t)\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\varphi_\alpha(1t)}{\partial t}\mathrm{d}1\mathrm{d}t - \int \delta\varphi_\alpha^*(1t)\frac{p_1^2}{2m}\varphi_\alpha(1t)\mathrm{d}1\mathrm{d}t \\ &\qquad - \sum_\beta \int \delta\varphi_\alpha^*(1t)\varphi_\beta^*(2t)U(12)(\varphi_\beta(2t)\varphi_\alpha(1t) \\ &\qquad - \varphi_\beta(1t)\varphi_\alpha(2t))\mathrm{d}2\mathrm{d}1\mathrm{d}t = 0 \end{aligned}$$

由于 $\delta\varphi_\alpha^*$ 任意，得到 $A$ 个粒子的独立粒子量子态的 TDHF 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\varphi_\alpha}{\partial t} - \frac{\hat{p}^2}{2m}\varphi_\alpha - \sum_\beta \int \mathrm{d}2\varphi_\beta^*(2t)U(12)[\varphi_\beta(2t)\varphi_\alpha(1t) - \varphi_\beta(1t)\varphi_\alpha(2t)] = 0$$

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\varphi_\alpha}{\partial t}=\frac{\hat{p}^2}{2m}\varphi_\alpha+\hat{U}_{HF}(1t)\varphi_\alpha(1t)=\hat{h}_{\mathrm{TDHF}}\varphi_\alpha \tag{3-13a}$$

TDHF 的单粒子 Hamilton 量为

$$\hat{h}_{\mathrm{TDHF}}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\hat{U}_{\mathrm{TDHF}} \tag{3-13b}$$

时间有关的平均场为

$$\hat{U}_{\mathrm{TDHF}}\varphi_\alpha=\sum_\beta\int \mathrm{d}2\varphi_\beta^*(2t)U(12)[\varphi_\beta(2t)\varphi_\alpha(1t)-\varphi_\beta(1t)\varphi_\alpha(2t)] \tag{3-13c}$$

$\hat{U}_{\mathrm{TDHF}}$ 中的第一项是平均场的直接项，为定域势; 第二项是交换项, 为非定域势。

上述方程称为时间有关的 Hartree-Fock 方程 (TDHF)，是一组 $A$ 个粒子的独立粒子量子态的时间有关的平均场方程。求解这一方程是初值问题 (而非本征值问题)，通常用迭代的方法求解，即给出 $t=t_0$ 的初始条件 $\varphi_\alpha(t_0)$(对所有 $A$ 个粒子, 即 $\alpha=1,2,\cdots,A$)，通过上式计算初始平均场 $\hat{U}_{\mathrm{TDHF}}(t_0)$，然后从 TDHF 方程计算下一时刻的 $A$ 个量子态 $\varphi_\alpha(t_0+\Delta t)$，如此迭代下去，得到任意时刻 $t$ 的 $A$ 个粒子的量子态解 $\varphi_\alpha(t)$。

由 TDHF 方程可以证明 (用迭代法证明)，若初始时刻的 $\varphi_\alpha$ 正交归一

$$\langle\varphi_\alpha(t_0)|\varphi_\beta(t_0)\rangle=\delta_{\alpha\beta} \tag{3-14a}$$

则任意时刻的解也正交归一

$$\langle\varphi_\alpha(t)|\varphi_\beta(t)\rangle=\delta_{\alpha\beta} \tag{3-14b}$$

即 TDHF 方程保持单粒子态的正交归一性不变。

2. 定态极限: HF 方程

在定态极限下，令

$$\varphi_\alpha(\vec{r},t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon_\alpha t/\hbar}\varphi_\alpha(\vec{r}) \tag{3-15}$$

代入 TDHF 方程 (3-13a)，左边为

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon_\alpha t/\hbar}\varepsilon_\alpha\varphi_\alpha(\vec{r})$$

右边动能项为

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon_\alpha t/\hbar}\frac{\hat{p}^2}{2m}\varphi_\alpha(\vec{r})$$

势能项中的时间因子 $\exp[\mathrm{i}\varepsilon_\beta t/\hbar]$ 与 $\exp[-\mathrm{i}(\varepsilon_\alpha+\varepsilon_\beta)t/\hbar]$ 抵消后剩下 $\exp[\mathrm{i}\varepsilon_\alpha t/\hbar]$，两边消去这个时间公因子后，得到

$$\hat{h}_{\mathrm{HF}}\varphi_\alpha=\left(\frac{\hat{p}^2}{2m}+\hat{U}_{\mathrm{HF}}\right)\varphi_\alpha=\varepsilon_\alpha\varphi_\alpha \tag{3-16a}$$

$$\hat{U}_{\text{HF}}\varphi_\alpha=\sum_\beta\int \mathrm{d}2\varphi_\beta^*(2)U(12)[\varphi_\beta(2)\varphi_\alpha(1)-\varphi_\beta(1)\varphi_\alpha(2)] \tag{3-16b}$$

这就是著名的 Hartree-Fock 方程。这是一组 $A$ 个粒子的本征态 $\varphi_\alpha$ 和本征能量 $\varepsilon_\alpha$ 的非线性的自洽场方程，是本征值问题 (而非初值问题)。$\varphi_\alpha$、$\varepsilon_\alpha$ 和 $U_{\text{HF}}$ 三者要自洽确定，即有计算逻辑 $(\varphi_\alpha，\varepsilon_\alpha)\rightarrow U_{\text{HF}}\rightarrow(\varphi_\alpha，\varepsilon_\alpha)$。

HF 方程也可以从能量泛函定态变分得到 ( 把函数的自变量换成函数，函数就变成泛函, 因此泛函就是函数的函数) 。设多体系统的定态波函数 $\varPhi_A$ 由 $A$ 个粒子的时间无关的量子态 $\varphi_\alpha$ 的 Slater 行列式组成，这 $A$ 个粒子的波函数 $\varphi_\alpha(\vec{r})$ 是待定的。计算 $\hat{H}$ 对 $\varPhi_A$(即对 $\varphi_\alpha$) 的能量平均值的泛函

$$\begin{aligned}E=E[\varphi_\alpha]&=\langle\varPhi_A|\hat{H}|\varPhi_A\rangle\\&=\sum_\alpha\int \mathrm{d}1\varphi_\alpha(1)^*\frac{\hat{p}^2}{2m}\varphi_\alpha(1)+\frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta}\int \mathrm{d}1\mathrm{d}2\varphi_\alpha^*(1)\varphi_\beta^*(2)\\&\qquad U(12)[\varphi_\alpha(1)\varphi_\beta(2)-\varphi_\alpha(2)\varphi_\beta(1)]\end{aligned} \tag{3-17}$$

考虑归一化条件

$$\langle\varPhi_A|\varPhi_A\rangle=\sum_\alpha\int \mathrm{d}1\varphi_\alpha^*(1)\varphi_\alpha(1)=A \tag{3-18}$$

式 (3-17) 是 $A$ 个待定波函数 $\varphi_\alpha$ 的泛函 (称能量泛函)，求 $E[\varphi_\alpha]$ 在式 (3-18) 下对 $\varphi_\alpha$ 的变分极值问题，即 $\delta_{\varphi_\alpha^*}E[\varphi_\alpha]=0,\delta_{\varphi_\alpha^*}\langle\varphi_\alpha|\varphi_\alpha\rangle=0$ 或按 Lagrange 乘子方法，可把约束条件 (3-18) 纳入泛函变分

$$\delta_{\varphi_\alpha^*}I[\varphi,\varepsilon]=0,\quad I[\varphi,\varepsilon]=E[\varphi]-\varepsilon\langle\varPhi_A|\varPhi_A\rangle \tag{3-19}$$

可得 HF 方程

$$\hat{h}_{\text{HF}}\varphi_\alpha=\left(\frac{\hat{p}^2}{2m}+\hat{U}_{\text{HF}}\right)\varphi_\alpha=\varepsilon_\alpha\varphi_\alpha$$

这时, $\varepsilon_\alpha$ 是作为 Lagrange 乘子出现的。

从 HF 方程也可以证明，HF 方程在迭代求解中，保持单粒子态 $\varphi_\alpha$ 的正交归一性，即

$$\langle\varphi_\alpha|\varphi_\beta\rangle=\delta_{\alpha\beta}$$

在迭代的每一步都应保持。

此外，TDHF 和 HF 方程还保持系统的某些对称性。如计算开始时, 自洽场是球对称的，则自洽过程中始终是球对称的。

3. TDHF 和 HF 方程的数值求解

TDHF 和 HF 方程是非线性的偏微分方程，比较复杂，一般只能数值求解。对各类典型的物理问题，都有比较成熟的求解程序。现把数值求解的主要问题和基本步骤做一简要的介绍，以有助于学习与使用有关程序。

对 TDHF 和 HF 方程求解的表象问题：①首先要选取适当的单粒子态表象 $\{\eta_\alpha\}$，这一表象能用有限数目的基矢很好的模拟 (逼近) 有关物理问题中平均场中的单粒子态，使得表象 $\{\eta_\alpha\}$ 的基矢的数目尽可能少，既能减少计算量，又能得到足够精确的结果。$\{\eta_\alpha\}$ 表象的基矢最好是解析的，以简化许多积分计算。在原子物理中，通常选取类氢原子表象；在原子核物理中，通常选取谐振子表象；在固体物理中，情况比较复杂，有各种表象的选取以适合不同的情况。应当指出, 任何完备因而基矢数目无限的单粒子态表象都是平等的 (等价的), 然而计算只能在有限数目的因而是不完备的单粒子态表象中进行, 这就产生了前面阐述的工作表象选择优劣问题。②表象选定以后，就要把待求的单粒子态按表象的基矢展开，把关于 $\varphi_\alpha$ 的微分 (积分) 方程化为展开式系数的代数方程求解。近年来，随着有限元方法的发展，人们也在坐标空间求解平均场方程，把时空离散化变成网格，然后把微分方程化为网格上的差分方程求解。无论哪种解法，都要处理计算量 (基矢数目) 与精度之间的矛盾，巧妙的计算方法在于用尽可能少的基矢 (或网格) 得到尽可能精确的结果, 这就需要物理洞察力和计算经验。

求解 TDHF 方程的步骤：①给定单粒子态的初始条件 $\varphi_\alpha(t_0)$；②计算自洽场 $U_{\mathrm{TDHF}}(t_0)$；③用 TDHF 方程计算下一时刻 $t_0+\Delta t$ 的单粒子态 $\varphi_\alpha(t_0+\Delta t)$；④重复②、③两步直到所需要的时刻 $t=t_0+n\Delta t$，求得 $\varphi_\alpha(t)$；⑤上述计算过程或者在一定表象的基矢中进行，或者在时空网格上进行。

求解 HF 方程的步骤：①从物理考虑设定一组合理的单粒子本征态初值 $\{\varphi_\alpha^0, \varepsilon_\alpha^0)$；②计算 $U_{\mathrm{HF}}[\varphi_\alpha^0]$；③从自洽场方程计算出下一轮的 $\{\varphi_\alpha^1,\varepsilon_\alpha^1\}$, 与 $\{\varphi_\alpha^0,\varepsilon_\alpha^0\}$ 比较后，对 $\{\varphi_\alpha^1,\varepsilon_\alpha^1\}$ 向收敛方向作适当调整；④用调整后的 $\{\varphi_\alpha^1,\varepsilon_\alpha^1\}$ 重复②、③两步计算，一直到 $\{\varphi_\alpha^n,\varepsilon_\alpha^n\}$ 与 $\{\varphi_\alpha^{n-1},\varepsilon_\alpha^{n-1}\}$ 在所要求的精度下达到自洽。上述计算可以在选定表象下进行，也可以在空间网格上进行。

### 3.2.3 玻色子系统的平均场理论

相互作用的玻色子系统的平均场理论，可以仿照费米子系统那样建立。这时，多体系统的波函数，应当是 $A$ 个粒子的波函数的乘积的对称化组合。由于波函数的完全对称性，与费米子系统不同，同一单粒子态 $\varphi_\alpha$，可以填充一个以上的粒子，因而单粒子量子态 $\varphi_\alpha$ 的数目可以小于粒子的数目 (对费米子系统二者必须相等)。从平均场理论求得的玻色子系统的状态一般不是系统的基态，处于较高能级的玻色子，可以向低能级状态跃迁，不管这些状态是否填充有粒子。因此，在平均场近

似下，玻色子系统的基态是所有粒子都填充最低能级的 Bose-Einstein 凝聚态 (其平均场方程是 Gross-Pitaevskii 方程)。由于这个最低能级粒子数很多，可以达到宏观可观察的程度，因此 Bose-Einstein 凝聚是宏观可观测的量子现象 —— 宏观量子现象，超导、超流都是这类现象。

由于玻色子不遵守 Pauli 原理，即使平均场产生了单粒子能级，玻色子多体系统也不会产生稳定的壳层结构。因此，壳层结构是费米子系统所特有的。

### 3.2.4 平均场理论的意义

平均场理论是相互作用的多粒子系统的非微扰理论，是独立粒子运动模型的微观理论基础，是进一步处理量子力学多体问题的出发点。

对于费米子多体系统，平均场理论的物理后果如下：

(1) 原子中电子运动出现壳层结构，从而导致原子化学性质的周期性。

(2) 原子核中的质子与中子的运动, 由于平均场存在而出现壳层结构，原子核的基态性质出现由幻数表征的周期性与稳定性。

(3) 对于具有周期性晶体结构的固体，电子所感受到的周期性的平均场使固体中的电子的运动具有能带结构，导致固体的导电与绝缘。

(4) 平均场理论的局限性在于它忽略了剩余相互作用和与之相应的多体关联, 因此是近似理论, 需要进一步修正, 包括多体关联。

总之, 费米子系统的平均场理论，是原子和原子核壳层结构模型的微观理论基础，也是固体能带论的微观理论基础, 更是处理多体关联的量子多体理论的出发点。3.3 节将具体介绍这方面的内容。

## 3.3 原子的平均场理论：原子的壳层结构

### 3.3.1 原子中电子的运动，类氢原子和电子–电子 Coulomb 相互作用修正

从原子核电荷为 $Z$ 的类氢原子，可以计算出电子运动的能级与波函数

$$E_n(z) = -\frac{E_0(z)}{n^2}, \quad \psi_{nlm} \tag{3-20}$$

其中，$E_n(z)$ 是氢原子的 $E_0$ 中把原子核电荷从 1 变为 $Z$ 的结果，Bohr 半径也要做相应的改变，$\psi_{nlm}$ 是氢原子波函数，但要用与 $Z$ 有关的 Bohr 半径 (变小)。

对于主量子数 $n$，$l$ 取值为 $l=0,1,\cdots,n-1$，每个 $l$ 有 $(2l+1)$ 个 $m$ 值，每个 $\psi_{nlm}$ 有两个自旋态。所以对能级 $E_n$，简并的状态数为 $D_n = 2\sum\limits_{l=0}^{n-1}(2l+1) = 2n^2$。由此可以计算出每个能级所能填充的电子数：

$$\begin{aligned} n &= 1,2,3,4,5,6,\cdots \\ D_n &= 2,8,18,32,50,72,\cdots \end{aligned}$$

因此，略去电子–电子之间 Coulomb 相互作用以后，电子在原子中的填充按照上表形成不同的能壳，每个能壳的能量为 $E_n$，可填充电子数为 $D_n$，这就是从类氢原子得出的原子的壳层结构图像。这纯粹是类氢原子中原子核的 Coulomb 外场对电子作用的量子力学结果，壳层结构的出现与单体势场中的独立粒子运动有关。然而，实际上电子–电子之间存在着 Coulomb 相互作用，它是二体相互作用，会破坏类氢原子中电子的独立粒子运动，有可能导致壳层结构的破坏。事实表明，原子的壳层结构和由此产生的化学周期性并没有被破坏，只是有若干修改。这暗示，考虑电子–电子 Coulomb 相互作用以后，原子中电子的单体平均场仍然近似地存在，只不过需要对类氢原子的单体势场作某些修改，加进电子之间相互作用产生的自洽平均场[4]。

原子中存在着平均场有以下的原因：

(1) 原子核 (特别是 $Z$ 大的原子核)，提供了一个很强的外在的势场中心，即原子核的 Coulomb 场。

(2) 电子之间的相互作用是长程的、不很强的 Coulomb 相互作用，它们的叠加和平均，能产生一个相当光滑的平均场，叠加在原子核势场之上。

(3) 对基态和低激发态原子，特别是满壳外只有一两个电子的原子，由于 Pauli 原理的限制，电子之间的剩余相互作用只能导致电子向满壳外的能级上跃迁，满壳以下能级之间的跃迁由于 Pauli 原理受到完全抑制。由于不同壳层之间能级差比剩余相互作用强度大，向满壳外的电子态的跃迁也受到部分抑制 (能量标度原理)。因此，在基态和低激发态，Pauli 阻塞效应和壳层之间大的能级差抑制了二体剩余相互作用对平均场和壳层结构的破坏作用，使平均场仍是好的近似，壳层结构得以保持 (图 3-1)。

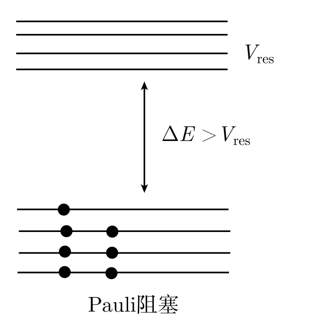



图 3-1 Pauli 阻塞效应和壳层之间大的能级差抑制了二体剩余相互作用, 导致平均场的有效性

总之，考虑电子–电子之间 Coulomb 相互作用以后，原子中电子的运动仍具有较好的自洽平均场，它叠加在原子核的 Coulomb 外场之上，产生了适当修正的电子的壳层结构。

### 3.3.2 原子的平均场理论

从历史上看，量子多体系统的平均场理论和壳层模型是发源于原子物理的，HF 理论也是根据原子物理的需要发展起来的[4]。

原子物理的平均场理论的特点：

(1) 原子核与电子相比, 其巨大的质量提供了一个天然的势场中心。

(2) 原子核电荷 (特别是 $Z$ 大的核电荷) 提供了一个很强的外场 (原子核的 Coulomb 场)。

(3) 电子–电子之间的 Coulomb 相互作用不是很强, 而且是长程的，它们产生光滑的自洽平均场只是对类氢原子势场的修正。

上述特点使得原子中电子的自洽平均场仅对类氢原子势场作一定的修正，壳层结构不会发生根本性的变化。因此, 原子物理的自洽平均场理论特别成功。下面将建立原子物理的自洽平均场的 Hartree-Fock (HF) 方程。

原子系统的 Hamilton 量为

$$\hat{H}=\sum_{i=1}^{Z}\left(\frac{\hat{p}_i^2}{2\mu}-\frac{Ze^2}{r_i}\right)+\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}^{Z}\frac{e^2}{|\vec{r}_i-\vec{r}_j|} \tag{3-21}$$

按照 3.2 节的一般理论，可以得到原子中电子运动的自洽场 (HF) 方程

$$\hat{h}_{\mathrm{HF}}\varphi_\alpha=\varepsilon_\alpha\varphi_\alpha \tag{3-22a}$$

其中，单电子的 Hamilton $\hat{h}$ 为

$$\hat{h}=\frac{\hat{p}^2}{2\mu}-\frac{Ze^2}{r}+\hat{U}_{\mathrm{HF}} \tag{3-22b}$$

$$\hat{U}_{\mathrm{HF}}(1)\varphi_\alpha(1)=\sum_\beta\int \mathrm{d}2\varphi_\beta^*(2)\frac{e^2}{|\vec{r}_2-\vec{r}_1|}[\varphi_\beta(2)\varphi_\alpha(1)-\varphi_\beta(1)\varphi_\alpha(2)] \tag{3-22c}$$

显然，HF 自洽场 $\hat{U}_{\mathrm{HF}}$ 是电子–电子 Coulomb 相互作用产生的自洽场对核势场– $Ze^2/r$ 的修正。求解上述自洽场方程，可以得比类氢原子的解更接近实际的解。

### 3.3.3 原子平均场理论的改进，能量密度泛函理论

随着原子光谱数据精度的提高，对原子平均场理论的要求越来越高，现代的原子平均物理论已经超越了 HF 近似，通过能量密度泛函或平均场的密度泛函的方法，不但较简便地包括了平均场的部分交换势，而且在不同程序上包括了 HF 平均场近似所忽略的多体关联效应。为了说明能量密度泛函方法，考虑平均场对密度的积分 (平均场所对应的势能)

$$\begin{aligned}
&\int\sum_\alpha[\hat{U}_{\mathrm{HF}}(\vec{r})\varphi_\alpha(\vec{r})]\varphi_\alpha^*(\vec{r})\mathrm{d}\vec{r}\\
=&\sum_{\alpha\beta}\iint \mathrm{d}\vec{r}\mathrm{d}\vec{r}\,'\frac{e^2}{(\vec{r}-\vec{r}\,')}[\varphi_\alpha^*(\vec{r})\varphi_\beta^*(\vec{r}\,')\varphi_\alpha(\vec{r})\varphi_\beta(\vec{r}\,')-\varphi_\alpha^*(\vec{r})\varphi_\beta^*(\vec{r}\,')\varphi_\alpha(\vec{r}\,')\varphi_\beta(\vec{r})]\\
=&\iint \mathrm{d}\vec{r}\mathrm{d}\vec{r}\,'\frac{e^2}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|}[\rho(\vec{r},\vec{r})\rho(\vec{r}\,',\vec{r}\,')-\rho(\vec{r},\vec{r}\,')\rho(\vec{r}\,',\vec{r})]
\end{aligned} \tag{3-23}$$

其中，电子密度矩阵为

$$\rho(\vec{r},\vec{r}\,')=\sum_{\alpha}\varphi_{\alpha}^{*}(\vec{r})\varphi_{\alpha}(\vec{r}\,'),\quad \rho(\vec{r})=\rho(\vec{r},\vec{r}) \tag{3-24}$$

上述讨论表明平均场的直接项对应的能量 $\int \mathrm{d}\vec{r}\hat{U}_{\mathrm{HF}}(\vec{r})\rho(\vec{r})$ 可以表示成单粒子密度矩阵的泛函。3.6 节详细介绍能量密度泛函理论时, 将严格地证明多体系统非简并基态的能量是单粒子密度的泛函。

从密度泛函 $U=U[\rho]$ 出发，从多体理论的一般理论考虑和具体物理考虑，假定 $U[\rho]$ 的特定形式，不但可以模拟平均场的交换势，而且可以包括一些多体关联效应，使平均场近似更臻完善。

## 3.4　原子核的平均场理论：原子核的壳层结构

### 3.4.1　原子核中核子的独立粒子运动与幻数的存在

在量子核子动力学 (quantum nucleon dynamics，QND) 的理论框架内，原子核是由质子和中子组成的多体系统，质子和中子统称核子。质子之间存在着长程的 Coulomb 斥力，核子之间存在着短程的核力。核力是强相互作用，总体表现为很强的吸引力，但在极小距离也表现出斥力。

与原子系统不同，原子核系统不存在质量很大的势场中心。然而，令人惊奇的是，原子核存在着类似于原子壳层结构那样的幻数：当质子数 $Z$ 或中子数 $N$ 等于 2、8、20、28、50、82、126 等幻数时，原子核表现得特别稳定，类似于原子中的惰性气体。这暗示，当质子数或中子数等于幻数时，它们刚好填满一个壳层, 原子核特别稳定。在幻数上 (满壳外) 加一个核子，它的运动表现出很好的独立粒子特征，其状态可以用一个具有很好量子数的波函数来描述。按原子物理的经验，原子核中幻数、壳层结构和独立粒子运动的存在，表明原子核中也存在平均场，正是这种平均场导致独立粒子运动和壳层 (幻数) 的出现[5]。

### 3.4.2　原子核的平均场理论：TDHT 和 HF 近似

对于不存在大质量势场中心的原子核，核子–核子相互作用能产生平均场的主要原因是 Pauli 原理和能量标度原理对剩余相互作用的抑制作用。核子是费米子，在平均场近似下，对基态原子核，核子从最低能级逐一往上填充至某一最高能级 $\varepsilon_{\mathrm{F}}$，这一最高能级称 Fermi 能级。质子和中子填充各自的能级，它们的 Fermi 能级一般是不同的。由 Fermi 能确定的动量空间 (或其他量子数空间) 的表面称 Fermi 面。对于基态原子核，Fermi 面以下的能级全部被核子填满，对于幻数原子核，Fermi 面以上的能级处于下一壳层，其间的能量差较大。剩余相互作用会破坏核子的独立

粒子运动，引起核子从一个能级的量子态向另一个能级的量子态的跃迁。对于基态原子核, Fermi 面以下的状态全部被填满，由于 Pauli 原理，向这些已被填充的能级的量子态的跃迁是被禁止的，唯一可能的是向 Fermi 面以上空着的能级的量子态跃迁。对于幻数核，这种跃迁需要较高的能量，如果剩余相互作用的强度小于两个壳层之间的能量差，这种跃迁也被大大地削弱。因此，Pauli 原理抑制了 Fermi 面以下核子在不同量子态之间的跃迁，而壳层之间的能量差大而剩余作用强度小造成的能量标度不同，削弱了核子向 Fermi 面以上的能级的量子态的跃迁。因此, 剩余作用在两个方面受到抑制，导致原子核，特别幻数原子核有较好的平均场和独立粒子运动。

在量子核子动力学 (QHD) 的框架内，对于二体相互作用，原子核系统的 Hamilton 量可写成

$$\hat{H}=\sum_{i=1}^{A}\frac{\hat{p}_i^2}{2M}+\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}^{A}v(ij) \tag{3-25}$$

这里已在核子坐标中包括了同位旋 $\hat{\tau}_i$，其第三分量 $\hat{\tau}_3$ 像自旋算符 $\sigma_z$ 那样具有两个不同的本征态。用本征值为 “+” 的状态描述中子，为 “−” 的状态描述质子，这样就把质子和中子看作同一种粒子 (核子) 的两种不同状态，正像电子有自旋向上、向下两种状态一样。当然，把质子与中子看作同一种粒子的两种状态只是一种近似，略去了它们某些性质 (如质量) 的微小差别。事实上，这种处理在许多场合是方便的、很好的近似。在这种近似下核子的坐标包括空间坐标 $\vec{r}$、自旋坐标 $s_z$ 和同位旋坐标 $\tau_3, x=(\vec{r},s_z,\tau_3)$。

与电子系统不同，核子之间的相互作用 (核力) 是十分复杂的，目前还没有精确的表达式。因此，核力不清楚是原子核多体问题的基本困难之一。为了解决这一困难，有两种做法：

(1) 根据自由空间 (真空) 中核子–核子散射的数据，构造出自由空间的唯象核力，然后运用多体理论 (如 Brueckner 理论) 考虑核介质对核子–核子相互作用的修正。

(2) 基于核子–核子相互作用的一般性质和多体理论的一般结论，假定密度有关的等效的核子–核子相互作用，其中包括若干参数，用大量的原子核的基态性质去确定这组参数。这类核力中最著名的称为 Skyrme 力，其局域相互作用为

$$v_{\text{skyrme}}=t_1\delta(\vec{r}-\vec{r}\,')+t_2\delta(\vec{r}-\vec{r}\,')\delta(\vec{r}-\vec{r}\,'') \tag{3-26}$$

此外, Skyrme 力还包括长程 Yukawa 势 $v_{\text{Yukawa}}=v_0\dfrac{\mathrm{e}^{-\mu|\vec{r}-\vec{r}\,'|}}{\mu|\vec{r}-\vec{r}\,'|}$ 和 Coulomb 相互作用，Skyrme 力式 (3-26) 的第二项是三体极短程 $\delta$-力。

有了核力 $v(ij)$ 之后，就可以进行原子核的 TDHF 或 HF 计算。基于 Skyrme 力的 HF 计算很成功，可以再现大部分原子核的基态性质。

在 HF 近似的基础上，进一步考虑剩余相互作用中的短程对力，在准粒子近似下，可以建立起准粒子的平均场理论，即 Hartree-Fock-Bogoliubov ( HFB) 理论。

### 3.4.3　原子核平均场理论的唯象形式——壳层模型

基于等效核力的 HF 近似，仍可以看作微观的平均场理论。这一理论的计算量大，一般只能得到数值结果，物理图像不够直观。为了简明直观地表现平均场理论的物理图像，通常选用简单的单粒子势场去模拟自洽平均场。最常用的是带自旋–轨道力的谐振子势。对球形核，平均场单粒子 Hamilton 量可选为

$$\hat{h} = \frac{\hat{p}^2}{2M} + \frac{1}{2}M\omega^2 r^2 + C\vec{l}\cdot\vec{s} + D\vec{l}^2 \tag{3-27}$$

从这种单粒子 Hamilton 量，可以求得核子能级和波函数的解析结果。适当选取 $\omega$、$C$、$D$ 等参数，可以给出原子核的幻数。这种基于唯象平均场的理论，称为原子核的壳层模型，是 Mayor-Jensen 首先采用的原子核结构模型，并因此获得诺贝尔物理学奖。

### 3.4.4　原子核的相对论性平均场理论

上述基于 QND 的原子核的平均场理论是非相对论性的，可以推广到相对论情况。因为在相对论性能量，核子–核子碰撞会产生各种介子，核子也会发生内部激发而成为一般的重子，所以相对论性原子核多体理论是必须包含介子和一般重子自由度的量子多体理论。参与强作用的介子和重子统称强子，所以描述相对论性原子核多体问题的理论框架应当是量子强子动力学 (quantum hadron dynamics，QHD)。QHD 比较成熟而常用的理论是 Walecka 模型。当前在 Walecka 模型的框架内，已建立起相对论性的原子核的平均场理论。在这个理论中，核子按照包含自洽平均场的 Dirac 方程运动，核子感受到的平均场是由介子场的各种流密度产生的，而介子场方程中的源又是由核子的各种密度和流提供的。这样，核子场与介子场就成为一个耦合的自洽动力系统。在多数场合的具体计算中, 人们不太关心介子场的运动细节, 通常用核子波函数近似地表示介子场方程的解, 从而消去介子自由度, 只在核子的自由度空间求解, 极大地减少了计算量。

原子核的相对论性平均场理论比非相对论平均场理论取得了更大的成就，不但能解释非相对论平均场理论已解释了的所有现象，而且还说明一些前者不能说明的问题 (如自旋–轨道力、相对论平均场理论中核子的赝自旋对称性、张量力等会自动出现)。由于相对论性平均场理论基于 QHD，它使原子核平均场理论向 QCD 靠近了一步，成为当前原子核平均场理论研究的热点和发展的主流。

# 3.5 晶体的平均场理论：固体的能带结构

### 3.5.1 固体的量子力学多体问题

具有晶体结构的固体由点阵上的离子 (或原子) 和在离子附近或之间运动的电子组成。电中性晶体的点阵离子的电荷总量等于在其间运动的电子的电荷总量。晶体的 Hamilton 量为

$$\hat{H} = \hat{H}_{\mathrm{e}} + \hat{H}_{\mathrm{N}} + \hat{V}_{\mathrm{eN}} \tag{3-28a}$$

其中，电子的 Hamilton 量为

$$\hat{H}_{\mathrm{e}} = \sum_i \frac{-\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2_{r_i} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \tag{3-28b}$$

其中，第一项是电子的动能, 第二项是电子–电子之间的 Coulomb 相互作用势能。原子核 (离子) 的 Hamilton 量为

$$\hat{H}_{\mathrm{N}} = \hat{T}_{\mathrm{N}} + \hat{V}_{\mathrm{N}} = \sum_i \frac{-\hbar^2}{2M_i} \vec{\nabla}^2_{R_i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} V_{\mathrm{N}}(\vec{R}_i - \vec{R}_j) \tag{3-28c}$$

其中，第一项是原子核 (离子) 的动能, 第二项是离子–离子之间的相互作用势能。离子与电子相互作用势能为

$$\hat{V}_{\mathrm{eN}} = \sum_{i,j} V_{\mathrm{eN}}(\vec{R}_i - \vec{r}_j) \tag{3-28d}$$

式 (3-28c) 和式 (3-28d) 中对离子的处理存在着复杂性和技巧：通常把晶体上原子核外的电子分为内壳电子和外壳电子, 这种划分有一定的物理考虑和人为性。把内壳电子和原子核作为一个整体看作离子, 仅对外壳电子进行能带论计算, 这样就可以减少计算中电子自由度的数目, 从而减少计算量, 但却增加了计算离子–离子之间和离子–电子之间的相互作用势能的复杂性。当然, 也可以对原子核外所有的电子进行能带论计算, 这时离子就是原子核, 离子–离子之间和离子–电子之间的相互作用变得十分简单，即都是 Coulomb 相互作用, 但却增加了计算中电子自由度的数目, 使计算量大大增加。能带论计算的物理技巧就在于恰当地定义离子和准确地计算离子–离子之间和离子–电子之间的等效相互作用 [6,7]。

晶体的定态 Schroedinger 方程为

$$\hat{H}\,\Psi_\alpha(\vec{r}, \vec{R}) = E_\alpha\,\Psi_\alpha(\vec{r}, \vec{R}) \tag{3-29}$$

$\vec{r}$ 表示所有电子的坐标的集合，$\vec{R}$ 表示所有原子核 (离子) 的坐标的集合。

### 3.5.2　电子运动与原子核运动的分离：Born-Oppenheimer 绝热近似

由于晶体中原子核运动极为缓慢 (慢变量)，而电子运动极为迅速 (快变量)，因此在考察电子运动时，可以对原子核运动取绝热近似。在原子核坐标不变 ($\dot{\vec{R}} \to 0$) 的情况下，求解电子运动的本征方程

$$\hat{H}_0(\vec{r},\vec{R})\varPhi_n(\vec{r},\vec{R}) = \varepsilon_n(\vec{R})\varPhi_n(\vec{r},\vec{R}) \tag{3-30a}$$

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_{\mathrm{e}}(\vec{r}) + \hat{V}_{\mathrm{eN}}(\vec{r},\vec{R}) \tag{3-30b}$$

其中，原子核的坐标 $\vec{R}$ 被看作参数。由于 $\hat{H}_0$ 是厄米的，其本征矢组成正交完备系

$$\langle \varPhi_n | \varPhi_m \rangle = \delta_{nm} \tag{3-30c}$$

固体系统的总体波函数 $\varPsi(\vec{r},\vec{R})$ 可以按 $\varPhi_n(\vec{r},\vec{R})$ 展开：

$$\varPsi_\alpha(\vec{r},\vec{R}) = \sum_n \chi_n^\alpha(\vec{R})\varPhi_n(\vec{r},\vec{R}) \tag{3-31}$$

展开式系数 $\chi_n^\alpha(\vec{R})$ 是原子核坐标的函数, 描述原子核 (离子) 的运动。把式 (3-31) 代入式 (3-29)，从左边乘以 $\langle \varPhi_n|$ 并对所有电子坐标积分, 得 $\chi_n^\alpha(\vec{R})$ 的运动方程

$$\left[\sum_i -\frac{\hbar^2}{2M_i}\vec{\nabla}_{R_i}^2 + \varepsilon_n(\vec{R}) + C_n(\vec{R})\right]\chi_n^\alpha(\vec{R}) - \sum_{n'\neq n} C_{nn'}(\vec{R})\chi_{n'}^\alpha(\vec{R}) = E_{\alpha n}\chi_n^\alpha(\vec{R}) \tag{3-32a}$$

其中，

$$C_n(\vec{R}) = \langle \varPhi_n(\vec{r},\vec{R}) \Big| -\sum \frac{\hbar^2}{2M_i}\vec{\nabla}_{R_i}^2 \Big| \varPhi_n(\vec{r},\vec{R})\rangle_r + \hat{V}_{\mathrm{N}}(\vec{R}) \tag{3-32b}$$

$$\begin{aligned} C_{nn'}(\vec{R}) = {} & \langle \varPhi_n(\vec{r},\vec{R}) \Big| \sum_i \frac{\hbar^2}{2M_i} \Big| 2\vec{\nabla}_{R_i}\varPhi_{n'}(\vec{r},\vec{R})\rangle_r \cdot \vec{\nabla}_{R_r} \\ & + \langle \varPhi_n(\vec{r},\vec{R}) \Big| \sum_i \frac{\hbar^2}{2M_i}\vec{\nabla}_{R_i}^2 \Big| \varPhi_{n'}(\vec{r},\vec{R})\rangle_r \end{aligned} \tag{3-32c}$$

对所有电子的坐标 $\vec{r}$ 进行积分。$C_n, C_{nn'}$ 是原子核运动 (用动能算符 $\vec{\nabla}_R$ 表示) 引起的电子运动波函数的变化 (式 (3-32b)) 以及电子运动状态的跃迁 (式 (3-32c)) 对离子势能的贡献。在绝热近似下，离子运动导致的电子运动状态跃迁项 $C_{nn'}$ 可以忽略，原子核的运动方程化为

$$\left[\sum_i -\frac{\hbar^2}{2M_i}\vec{\nabla}_{R_i}^2 + \varepsilon_n(\vec{R}) + C_n(\vec{R})\right]\chi_{n\mu}^\alpha(\vec{R}) = E_{\alpha n\mu}\chi_{n\mu}^\alpha(\vec{R}) \tag{3-33}$$

其中，$\mu$ 表示原子核运动中不同于量子数 $(\alpha, n)$ 的其他量子数。式 (3-33) 就是晶体中离子运动的晶格动力学方程, 在谐振近似下简化为晶体点阵绕平衡点振动的声子的运动方程。

电子的运动方程 (3-30a) 明显写出后为

$$\left[\sum_i -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}_{r_i}^2 + \sum_{i\neq j}\frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \sum_{i,j} V_{\mathrm{eN}}(\vec{r}_i - \vec{R}_j)\right]\varPhi_n(\vec{r}, \vec{R}) = \varepsilon_n(\vec{R})\varPhi_n(\vec{r}, \vec{R}) \quad (3\text{-}34)$$

这一方程可以进一步简化为束缚在原子核周围的电子的运动方程 (局域电子的运动方程) 和在点阵之间运动的电子 (非局域电子或巡游电子) 的运动方程。

### 3.5.3　巡游电子运动方程的平均场近似：能带结构

对于束缚在原子核周围的电子的运动，可以像处理原子问题那样，运用原子的平均场近似, 但要考虑周围电子环境和离子环境的影响。对于晶体点阵共有的非束缚的巡游电子的运动的处理，是一个新问题，是本小节研究的对象。在绝热近似下，把电子运动与原子核运动分离之后，电子运动的方程仍然是很复杂的。电子受原子核的电磁作用，彼此之间又存在 Coulomb 相互作用。对于具有晶体结构一类的固体，原子核 (或由它形成的离子) 是作为晶体点阵骨架而周期性规则排列的。在低温情况下，它们基本上处于点阵的平衡位置而发生偏离平衡位置的微小振动。在零级近似下，可以认为原子核处于由晶体结构决定的点阵的平衡位置。它们对电子产生一个由晶体结构决定其周期的周期性势场，这个势场原则上可以从晶体结构和点阵离子的电子结构给出 (实际上很难算出晶体点阵结构，通常采用实验上测出的晶体结构数据，由此计算电子感受的离子产生的周期性势场)。这样一来，晶体中巡游电子的运动就成为周期性离子外场中的 Coulomb 电子气体的量子多体问题。对这一问题的零级近似，自然是把电子看成是在周期性离子外场和电子自身的自洽平均场中运动的独立粒子，这就是周期性外场中 Coulomb 电子气体的 HF 近似，其运动方程为

$$\hat{h}\psi_{kn}(\vec{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}_r^2 + U(\vec{r})\right]\psi_{kn}(\vec{r}) = E_{kn}\psi_{kn} \quad (3\text{-}35)$$

其中，$U(\vec{r})$ 包含周期性离子外场和电子的自洽场，而周期性离子外场由晶体点阵离子产生，其空间周期矢量 $\vec{R}_l$ 由晶体结构决定。在晶体周期外场的影响和诱导下，由于自洽场方程的非线性反馈效应和 HF 方程对系统的对称性的保持，使得电子的自洽场也具有相同的周期结构，因此

$$U(\vec{r} + \vec{R}_l) = U(\vec{r}), \quad \vec{R}_l = \sum_{i=1}^{3} R_{li}\vec{a}_i \quad (3\text{-}36)$$

$\vec{a}_i$ 为基本晶格矢量。设相应于 $\vec{R}_l$ 的离散平移群元为 $\hat{P}_{\vec{R}_l}=\mathrm{e}^{\vec{R}_l\cdot\vec{\nabla}_r}$，从晶体的周期性有

$$[\hat{P}_{\vec{R}_l},\ \hat{h}]=0 \tag{3-37}$$

这表示晶体中电子的平均场 Hamilton 量具有由晶格矢量所决定的离散的平移不变性。离散平移群是一般平移群的子群，自然也为 Abelian 群，只有一维不可约表示。

现求 $\hat{P}_{\vec{R}_l}$ 的本征矢。设 $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ 为其本征矢，令 $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})=\varphi_{\vec{k}}(\vec{r})u_{\vec{k}}(\vec{r})$，其中 $\varphi_{\vec{k}}(\vec{r})$ 描述非局域部分, $u_{\vec{k}}(\vec{r})$(主要) 描述局域部分和周期性, 则

$$\hat{P}_{\vec{R}_l}\psi_k(\vec{r})=\hat{P}_{\vec{R}_l}\varphi_k(\vec{r})\hat{P}_{\vec{R}_l}u_k(\vec{r})=p(k)\varphi_k(\vec{r})u_k(\vec{r}) \tag{3-38a}$$

由此有

$$\hat{P}_{\vec{R}_l}\varphi_k(\vec{r})=\varphi_k(\vec{r}+\vec{R}_l)=p(k)\varphi_k(\vec{r}) \tag{3-38b}$$

$$\hat{P}_{\vec{R}_l}u_k(\vec{r})=u_k(\vec{r}+\vec{R}_l)=u_k(\vec{r}) \tag{3-38c}$$

$\varphi_{\vec{k}}(\vec{r})$ 的解为

$$\varphi_k(\vec{r})=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}},p(k)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{R}_l} \tag{3-39a}$$

因此有

$$\psi_k(\vec{r})=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}u_k(\vec{r}),\quad u_k(\vec{r}+\vec{R}_l)=u_k(\vec{r}) \tag{3-39b}$$

$$\hat{P}_{\vec{R}_l}\psi_k(\vec{r})=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{R}_l}\psi_k(\vec{r}) \tag{3-39c}$$

称 $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ 为晶体中巡游电子运动的 Bloch 波函数，把它代入电子的本征方程 (3-35)，考虑到电子还有其他激发能级与量子数，故有

$$\hat{H}_k u_{nk}(\vec{r})=E_{nk}u_{nk}(\vec{r}) \tag{3-40a}$$

$$\hat{H}_k=\frac{-\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2+U(\vec{r})-\frac{\mathrm{i}\hbar^2}{m}\vec{k}\cdot\vec{\nabla}+\frac{\hbar^2k^2}{2m} \tag{3-40b}$$

由于周期条件

$$u_{nk}(\vec{r}+\vec{R}_l)=u_{nk}(\vec{r})$$
$$U(\vec{r}+\vec{R}_l)=U(\vec{r})$$

对于一个 $\vec{k}$，电子有很多能级 $E_{n\vec{k}}$。

考虑与 $\vec{R}_l$ 正交的波矢 $\vec{K}_m$(倒格矢)：

$$\vec{K}_m\cdot\vec{R}_l=2\pi\delta_{ml} \tag{3-41}$$

易证 $\psi_{\vec{k}+\vec{K}_m}$ 也是 $\hat{P}_{\vec{R}_l}$ 的本征矢，其本征值相同，因为

$$\psi_{n\vec{k}+\vec{K}_m} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\vec{k}+\vec{K}_m)\cdot\vec{r}} u_{nk+K_m} \tag{3-42}$$

所以, 由式 (3-39c) 和式 (3-41) 有

$$\hat{P}_{\vec{R}_l}\psi_{n\vec{k}+\vec{K}_m} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\vec{k}+\vec{K}_m)\cdot\vec{R}_l}\psi_{n\vec{k}+\vec{K}_m} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{R}_l}\psi_{n\vec{k}+\vec{K}_m} \tag{3-43}$$

由式 (3-43) 可证, $\hat{P}_{\vec{R}_l}$ 的简并本征态 $\psi_{n\vec{k}+\vec{K}_m}$ 的任意线性叠加

$$\psi_{n\vec{k}} = \sum_{K_m} C_{K_m}\psi_{n\vec{k}+\vec{K}_m} \tag{3-44}$$

也是 $\hat{P}_{\vec{R}_l}$ 的本征矢

$$\hat{P}_{\vec{R}_l}\psi_{n\vec{k}} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{R}_l}\psi_{n\vec{k}} \tag{3-45}$$

把式 (3-44) 代入电子的本征方程 (3-35)，有

$$E_{nk}\psi_{n\vec{k}} = \sum_{K_m} C_{K_m}E_{nk+K_m}\psi_{n\vec{k}+\vec{K}_m} = E_{nk}\sum_{K_m} C_{K_m}\psi_{n\vec{k}+\vec{K}_m} \tag{3-46}$$

由于 $C_{K_m}$ 的任意性，必有

$$E_{nk} = E_{nk+K_m} \tag{3-47}$$

因此，$E_{nk}$ 是以 $\vec{K}_n$ 为周期的连续函数。由函数论可知, 以 $\vec{K}_n$ 为周期的连续函数 $E_{nk}$，必有极大、极小值，从而形成能带 (图 3-2)。

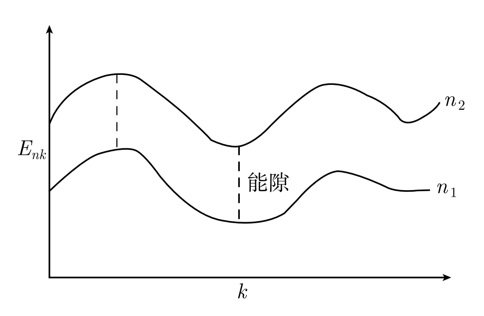



图 3-2　固体中巡游电子的能带结构

计算电子的平均场时，要用 $\psi_{n\vec{k}}$ 或 $u_{n\vec{k}}$ 去计算 HF 的自洽场，故关于 $u_{n\vec{k}}$ 和 $E_{n\vec{k}}$ 的本征方程是 HF 自洽场方程。

上述理论分析表明, 晶体的能带结构和 Bloch 波的产生, 是巡游电子在晶体的周期性自洽平均场中运动的结果。巡游电子为整个晶体所共有, 它们既受离子的局域电场的控制, 又受晶体共同平均场的控制, 其运动包含局域性和非局域性两个分量, 分别用 $u_{n\vec{k}}$ 和 $\varphi_{\vec{k}}$ 表示。这两个分量的竞争决定了能带的宽、窄等性质：局域性强导致窄能带, 而非局域性强导致宽能带。

### 3.5.4 固体平均场理论的改进

固体平均场理论的改进在两方面进行。一是选择尽可能好的表象基矢对 $u_{n\vec{k}}$ 展开，以期在尽可能小的子空间内求得尽可能精确的解。由此，发展出各种解法，如正交平面波法 (OPW)、赝势法、元胞法，缀加平面波法 (APW)，Wannier 表象，以及线性糕模轨道法 (linear muffe tin orbit，LMTO) 等。这方面的改进成为固体能带论专著的主要内容。二是改进平场势场以期更好的反映交换势并包括某些多体关联效应，基于能量密度泛函的各种近似就属于此类。

## 3.6 平均场理论的改进：密度泛函理论与局域密度近似

本节介绍平均场理论的改进的第二个方面：平均场理论中自洽平均场的改进, 其目标是在平均场中尽可能多地包括非定域交换势和多体关联效应, 这是通过密度泛函理论与局域密度近似来实现的。下面介绍这方面的内容 [8,9]。

### 3.6.1 量子多体系统基态的性质：能量最低、能量泛函对波函数变分极小

设量子多体系统的 Hamilton 量为

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U} + \hat{V} \tag{3-48a}$$

其中，动能 $\hat{T}$，Coulomb 相互作用 $\hat{U}$ 和外场 $\hat{V}$ 分别为

$$\hat{T} = \sum_i \frac{-\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2_{r_i}, \quad \hat{U} = \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}, \quad \hat{V} = \sum_i v(\vec{r}_i) \tag{3-48b}$$

系统的本征方程为

$$\hat{H}\varPhi_n = E_n\varPhi_n \tag{3-49}$$

其中本征波函数 $\varPhi_n$ 是正交完备的, 而本征能量从小到大排列

$$E_0 < E_1 < E_2 \cdots < E_n \cdots < \cdots$$

$\{E_0, \varPhi_0\}$ 是基态，假定它是非简并的 (即 $E_0 \leftrightarrow \varPhi_0$ 一一对应)。任一状态 $\varPhi'$ 可以按 $\{\varPhi_n\}$ 展开为

$$\varPhi' = \sum_{n=0} c_n\varPhi_n, \quad \sum_n |c_n|^2 = 1 \tag{3-50}$$

$\varPhi'$ 对应的能量泛函为

$$\begin{aligned} E[\varPhi'] &= \langle\varPhi'|\hat{H}|\varPhi'\rangle = \langle\varPhi'|\hat{T}+\hat{U}|\varPhi'\rangle + \int \mathrm{d}\vec{r}\rho'(\vec{r})v(\vec{r}) \\ &= \sum_n |c_n|^2 E_n \end{aligned} \tag{3-51a}$$

其中，单粒子密度为

$$\rho'(\vec{r}) = A\int \mathrm{d}\vec{r}_2\mathrm{d}\vec{r}_3,\cdots,\mathrm{d}\vec{r}_N\,\Phi'^*(\vec{r},\vec{r}_2,\vec{r}_3,\cdots,\vec{r}_N)\Phi'(\vec{r},\vec{r}_2,\vec{r}_3,\cdots,\vec{r}_N) \tag{3-51b}$$

$$\langle\Phi'|\hat{V}|\Phi'\rangle = \int \mathrm{d}\vec{r}\rho'(\vec{r})v(\vec{r}) \tag{3-51c}$$

显然，因为基态能量 $E_0$ 最低，其能量泛函的变分应为极小。事实上，设

$$\Phi' = \Phi_0 + \delta\Phi', \quad \delta\Phi' = \delta\sum_{n=1} c_n\Phi_n \quad (\delta\text{ 为无限小量}) \tag{3-52}$$

$$E_0[\Phi'] = E_0[\Phi_0] + \delta^2\sum_{n=1}|c_n|^2E_n \tag{3-53}$$

$$\delta E_0[\Phi'] = E_0[\Phi'] - E_0[\Phi_0] = \langle\delta\sum_{n=1}c_n^*E_n\Phi_n^*\delta\Phi'\rangle \tag{3-54}$$

得

$$\frac{\delta E_0[\Phi']}{\delta\Phi'}|_{\Phi'=\Phi_0} = \delta\sum_{n=1}c_n^*E_n\Phi_n^*|_{\delta=0} = 0 \tag{3-55}$$

由于 $\Phi_0$ 可产生唯一的 $\rho_0(\vec{r}\}$，而基态 $\Phi_0$ 又是非简并、唯一的，故对一个确定的系统，$\Phi_0$ 与 $\rho_0(\vec{r}\}$ 一一对应：$\Phi_0 \leftrightarrow \rho_0(\vec{r})$。

### 3.6.2 Hohenberg-Kohn 定理

**定理 1** 不计自旋的全同费米子系统的基态能量是单粒子密度 $\rho'(\vec{r})$ 的唯一泛函。

用反证法证明。设不同的外场 $v(\vec{r}),v'(\vec{r})$ 对应的 Hamilton 量为 $\hat{H},\hat{H}'$，其基态波函数为 $\Phi|_0,\Phi_0'$，相应的单粒子密度为 $\rho_0(\vec{r}),\rho_0'(\vec{r})$，其能量泛函为

$$E_0 = \langle\Phi_0|\hat{H}|\Phi_0\rangle, \quad E_0' = \langle\Phi_0'|\hat{H}'|\Phi_0'\rangle \tag{3-56}$$

且 $\hat{H},\hat{H}'$ 有下列关系：

$$\hat{H} - \hat{H}' = \hat{V} - \hat{V}' \tag{3-57}$$

倘若

$$\rho_0(\vec{r}) = \rho_0'(\vec{r}) \tag{3-58}$$

则由真正基态波函对应的能量最小可知

$$\langle\Phi_0'|\hat{H}|\Phi_0'\rangle = \langle\Phi_0'|\hat{H}' + \hat{V} - \hat{V'}|\Phi_0'\rangle = E_0' + \int \mathrm{d}\vec{r}\rho_0(\vec{r})[v(\vec{r}) - v'(\vec{r})] > E_0 \tag{3-59}$$

$$\langle\Phi_0|\hat{H}'|\Phi_0\rangle = \langle\Phi_0|\hat{H} + \hat{V}' - \hat{V}|\Phi_0\rangle = E_0 + \int \mathrm{d}\vec{r}\rho_0(\vec{r})[v'(\vec{r}) - v(\vec{r})] > E_0'$$

上两式相加得

$$E_0 + E_0' > E_0 + E_0' \tag{3-60}$$

这显然是矛盾的。因此，不同的外场 $v(\vec{r}), v'(\vec{r})$ 对应的单粒子密度 $\rho_0(\vec{r}), \rho_0'(\vec{r})$ 必定不同，$v(\vec{r})$ 与 $\rho_0(\vec{r})$ 一一对应, 导致 $E_0$ 与 $\rho_0$ 一一对应：

$$v(\vec{r}) \leftrightarrow \rho_0(\vec{r}) \rightarrow E_0 \leftrightarrow \rho_0 \tag{3-61}$$

由于 $\rho_0(\vec{r}\}$ 与 $\varPhi_0$ 之间是一一对应，而 $\varPhi_0$ 决定了基态的全部性质，因此，单粒子密度 $\rho_0(\vec{r})$ 是系统及其性质的基本表征变量。

**定理 2** 基态能量 $E_0[\rho]$ 当单粒子密度 $\rho(\vec{r}) = \rho_0(\vec{r})$ 时取极小值，即

$$\left.\frac{\delta E_0[\rho]}{\delta \rho}\right|_{\rho=\rho_0} = 0 \tag{3-62}$$

**证明** 由 $\rho_0(\vec{r}) \leftrightarrow \varPhi_0$ 可知，$\varPhi_0$ 是 $\rho_0(\vec{r})$ 的泛函

$$\varPhi_0 = \varPhi_0[\rho_0(\vec{r})] \tag{3-63}$$

由式 (3-55) 知

$$\left.\frac{\delta E_0[\varPhi]}{\delta \varPhi}\right|_{\varPhi=\varPhi_0} = 0 \tag{3-64}$$

可得

$$\left.\frac{\delta E_0[\rho]}{\delta \rho}\right|_{\rho=\rho_0} = \left.\left\{\frac{\delta E_0[\varPhi]}{\delta \varPhi}\frac{\delta \varPhi[\rho]}{\delta \rho}\right\}\right|_{\rho=\rho_0} = 0 \tag{3-65}$$

3.6.3 小节的内容表明，定理 2 给出的是计算基态单粒子密度 $\rho_0(\vec{r})$ 的途径。

### 3.6.3 Kohn-Sham 方程

根据上述定理，费米子多体系统的基态能量泛函可表示为

$$E_0[\rho] = T[\rho] + \int \mathrm{d}\vec{r} v(\vec{r})\rho(\vec{r}) + \frac{e^2}{2}\iint \mathrm{d}\vec{r}\mathrm{d}\vec{r}'\frac{\rho(\vec{r})\rho(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} + E_{xc}[\rho] \tag{3-66}$$

其中，第一项是动能泛函，第二项是外场项，第三项是 Coulomb 相互作用的平均场近似下的直接项，$E_{xc}[\rho]$ 包含 Coulomb 相互作用的平均场近似下的交换项和平均场近似下忽略了的多体关联项，它包含非定域 (或动量相关) 成分。剩下的问题：①如何确定 $\rho$? ②如何确定 $T[\rho]$? ③如何确定 $E_{xc}[\rho]$?

第 1、2 两个问题由 Kohn-Sham 解决。他们假定 $T[\rho]$ 可用无相互作用系统的动能泛函 $T_s[\rho]$ 表示，而把修正项 (包含非定域或动量相关成分) 放到 $E_{xc}[\rho]$ 中去。其中，

$$\rho(\vec{r}) = \sum_i \psi_i(\vec{r})\psi_i^*(\vec{r}) \tag{3-67}$$

$$T_s[\rho(\vec{r})] = \sum_i \psi_i^*(\vec{r}) \frac{-\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \psi_i(\vec{r}) \tag{3-68}$$

这样一来，基态能量泛函 $E_0[\rho]$ 对 $\rho$ 的变分极值问题就变成对 $\psi_i(\vec{r})$ 在归一化条件 $\langle\psi_i|\psi_i\rangle = 1$ 下的变分极值问题

$$\delta_{\psi_i^*}\left(E_0[\psi_i, \psi_i^*] - \sum_i \varepsilon_i \langle\psi_i|\psi_i\rangle\right) = 0 \tag{3-69}$$

由此得

$$\frac{\delta E_0[\psi_i, \psi_i^*]}{\delta\psi_i^*} - \varepsilon_i\psi_i = 0 \tag{3-70}$$

或

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V_{\mathrm{KS}}[\rho]\right)\psi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i\psi_i(\vec{r}) \tag{3-71}$$

其中，

$$V_{\mathrm{KS}}[\rho] = v(\vec{r}) + e^2 \int \mathrm{d}r' \frac{\rho(\vec{r}\,')}{|\vec{r} - \vec{r}\,'|} + \frac{\delta E_{xc}[\rho]}{\delta\rho} \tag{3-72}$$

方程 (3-67)、方程 (3-71)、方程 (3-72) 是著名的 Kohn-Sham 方程，是 HF 平均场方程的改进，在原子物理和凝聚态物理领域中有广泛的应用，Kohn 因此获得诺贝尔化学奖。

剩下的问题是找出合理的 $E_{xc}[\rho]$。

应当指出, 单粒子密度的表达式 (3-67) 清楚地表明 Kohn-Sham 方程在本质上是独立粒子近似下的平均场理论，因为单粒子密度矩阵 (3-67) 式中粒子态填充数 $n_i$ 取值 1 或 0, 是费米子系统的独立粒子近似下平均场理论的本质特征。Kohn-Sham 方程只是通过平均场中的交换–关联项 $V_{xc}$ 包含多体关联对平均场的贡献，并未改变独立粒子图像这一平均场理论的本质特征，更未显式地包含多体关联自由度。可以严格证明, 在一个显式包含多体关联的理论中，单粒子密度的表达式 (3-67) 中一定要出现取值在 0 和 1 之间的单粒子态 $\psi_i$ 的填充几率：$n_i < 1$。总之, 只要单粒子态的运动方程 (如 Kohn-Sham 方程) 中, 使用作为单体算符的平均场描述多体相互作用, 只要单粒子密度矩阵取式 (3-67) 的形式, 这种理论在本质上就是独立粒子近似下平均场理论 (第 5 章和第 13 章)。

超导体物理中 BCS 理论，则是在准粒子表象的平均场中包含粒子对相互作用和粒子对关联, 而正是粒子对关联使得在粒子表象中的填充数具有不同于矩形分布的弥散分布。

### 3.6.4 $E_{xc}[\rho]$ 的局域密度近似

知道 $E_{xc}[\rho]$ 才能求解 Kohn-Sham 方程。$E_{xc}[\rho]$ 是非定域的，给寻找它带来困难。为此，Kohn-Sham 对 $E_{xc}[\rho]$ 做了局域假定：假设 $E_{xc}[\rho]$ 是 $\rho(\vec{r})$ 的局域泛函。

在局域泛函的范围内找出合理的 $E_{xc}[\rho]$，需要理论的探索和物理经验的启示，这是运用密度泛函处理实际问题的关键。通常最简单的做法是对于均匀电子系统, 电子密度是常数, 容易求得其能量泛函, 然后取其泛函形式, 只是把电子密度从常数变成随坐标变化的局域密度。密度泛函理论在凝聚态问题的应用和发展，都与 $E_{xc}[\rho]$ 的寻找和改进有关。这里有大量的工作成果，详细情况可参考有关文献。

### 3.6.5　Car-Parrinello 的从头算分子动力学

Car-Parrinello 的从头算分子动力学 (ab initio molecular dynamics, CP-AIMD)[10] 是一种巧妙设计的赝动力学, 它把定态本征值问题变成趋向平衡态极小值的时间有关的动力学问题。首先大胆构造下述赝动力学的 Lagrange 泛函

$$L=\sum_i\frac{\mu}{2}\int_{\Omega}\mathrm{d}\vec{r}^3|\dot{\psi}_i|^2+\sum_l\frac{M_l}{2}\dot{R}_l^2+\sum_\nu\frac{\mu_\nu}{2}\dot{\alpha}_\nu^2-E_0[\{\psi_i\},\{R_l\},\{\alpha_l\}] \tag{3-73a}$$

和相应的作用量

$$I=\int L(t)\mathrm{d}t \tag{3-73b}$$

其中, 把单电子波函数 $\{\psi_i\}$ 和形状–应力–体积等约束变量 $\{\alpha_\nu\}$ 看作广义赝坐标, $\{\mu,\mu_\nu\}$ 是相应的赝惯性参数, 系统的能量 $E_0$ 由在一定的形状–应力–体积变量 $\{\alpha_\nu\}$ 的约束条件下的式 (3-66) 给出。C-P 运动方程由 $I$ 的变分极小给出。分别对 $\psi_i^*,\vec{R}_l,\alpha_\nu$ 变分, 就可得：

(1) 电子运动方程

$$\delta_{\psi_i^*}I=0\rightarrow\quad \mu\ddot{\psi}_i(\vec{r},t)=-\frac{\delta E_0}{\delta\psi_i^*(\vec{r},t)}+\sum_k\varLambda_{ik}\psi_k(\vec{r},t) \tag{3-74a}$$

(2) 离子运动方程

$$\delta_{R_l}I=0\rightarrow\quad M_l\ddot{R}_l=-\nabla_{R_l}E_0 \tag{3-74b}$$

(3) 约束方程

$$\delta_{\psi_i^*}I=0\rightarrow\quad \mu_\nu\ddot{\alpha}_\nu=-\frac{\delta E_0}{\delta\alpha_\nu} \tag{3-74c}$$

因为式 (3-74) 是二阶微分方程, 需要坐标和速度的初始条件 $\{\psi_i,R_l,\alpha_\nu\}$ 和 $\{\dot{\psi}_i,\dot{R}_l,\dot{\alpha}_\nu\}$。通过改变速度初始条件 $\{\dot{\psi}_i,\dot{R}_l,\dot{\alpha}_\nu\}$, 可以降低系统的温度 $T$ 使得加速度 $(\ddot{\psi}_i,\ddot{\vec{R}}_l,\ddot{\alpha}_\nu)$ 趋于零, 因而得到电子在约束条件下的定态本征方程 (带约束的电子的 Kohn-Sham 方程和离子的平衡方程)：

(1) 电子定态方程

$$-\frac{\delta E_0}{\delta\psi_i^*(\vec{r},t)}+\sum_k\varLambda_{ik}\psi_k(\vec{r},t)=0 \tag{3-75a}$$

(2) 离子平衡方程

$$\nabla_{R_l} E_0 = 0 \tag{3-75b}$$

(3) 约束平衡方程

$$\frac{\delta E_0}{\delta \alpha_\nu} = 0 \tag{3-75c}$$

实际计算中, 系统不会完全趋于平衡. 对平衡态的偏离可以用赝动能 $K$ 来度量

$$K = \sum_i \frac{\mu}{2} \int_\Omega \mathrm{d}\vec{r}^3 |\dot{\psi}_i|^2 + \sum_l \frac{M_l}{2} \dot{R}_l^2 + \sum_\nu \frac{\mu_\nu}{2} \dot{\alpha}_\nu^2 \tag{3-76}$$

当 $K \to 0$ 时, 得 Kohn-Sham 方程的精确解。

### 3.6.6 时间有关的 Kohn-Sham 方程

在高压凝聚态物理研究中, 在高速原子碰撞中, 在超强激光脉冲与团簇相互作用中, 电子和离子的组态会发生剧烈的变化, 描述这种动力学变化过程最可行的近似是时间有关的平均场近似及其改进 —— 时间有关的 Kohn-Sham 方程 [11−14]。

首先, 要把 Kohn-Sham 静态能量泛函推广为时间有关的作用量泛函, 假定作用量泛函为

$$I[\rho] = I\{\psi_{i\sigma}\} = \int \mathrm{d}\vec{r}\mathrm{d}t \sum_{i\sigma} \left\{ \psi_{i\sigma}^*(\vec{r},t) \left( \mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2m}\vec{\nabla}^2 \right) \psi_{i\sigma}(\vec{r},t) - V[\rho\{\psi_{i\sigma}\}] \right\} \tag{3-77}$$

作用量变分极小得到时间有关的 Kohn-Sham 方程

$$\delta_{\psi_{i\sigma}^*} I = 0 \to \quad \mathrm{i}\frac{\partial \psi_{i\sigma}}{\partial t} = \left\{ -\frac{\vec{\nabla}^2}{2m} + U_\sigma[\rho](\vec{r},t) \right\} \psi_{i\sigma}(\vec{r},t) \tag{3-78}$$

时间有关的 Kohn-Sham 势包括离子势, 外电磁 (激光) 场, HF 平均场和交换–关联势

$$U_\sigma[\rho] = \frac{\delta V[\rho_\sigma]}{\delta \rho_\sigma(\vec{r},t)} = v_{\text{ion}}(\vec{r},t) + v_{\text{ext}}(\vec{r},t) + v_{\text{HF}}(\vec{r},t) + v_{xc\sigma}[\rho_\sigma](\vec{r},t) \tag{3-79}$$

其中,

$$\rho = \sum_\sigma \rho_\sigma = \sum_\sigma \sum_i \psi_{i\sigma}^*(\vec{r},t)\psi_{i\sigma}(\vec{r},t) \tag{3-80}$$

$$v_{\text{HF}} = e^2 \int \frac{\rho(\vec{r}',t)}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \mathrm{d}\vec{r}'^3 \tag{3-81}$$

$$v_{xc\sigma} = \frac{\delta E_{\text{exc}}}{\delta \rho_\sigma} \tag{3-82}$$

$E_{\text{exc}}[\rho_\sigma(\vec{r},t)]$ 是把定态的关联–交换势推广到时间有关的情况。上述时间有关的 Kohn-Sham 方程被成功地用于描述强激光场与团簇相互作用的非线性电子动力学现象。

## 3.7　散射与反应问题的平均场理论：光学模型

3.6 节讲述的是结合态问题的平均场理论，给出的单粒子态的本征能量是负的、间断的 (对晶体, 是不同能带的间断性)。粒子是束缚在原子、原子核或晶体中的。对于两个多体系统的碰撞，可能发生散射或反应，入射和出射粒子都会渐近地达到无穷远处。这是另一类更为复杂的量子多体问题，其特征是能量为正而且可连续变化，无穷远边界条件为非零的入射波和出射波条件。对这类量子多体问题的处理，也可以建立平均场理论，作为更精确处理问题的出发点[15]。

### 3.7.1　原子碰撞和原子核碰撞问题

两个原子或两个原子核发生碰撞，入射粒子 (炮弹) 和靶粒子都是量子多体系统，有内部结构，可以发生不交换能量只交换动量的弹性散射，引起内部激发的非弹性散射，以及炮弹和靶粒子交换粒子或发射粒子、内部结构发生重组变化的反应过程。随着碰撞能量的增加，弹性散射代之以非弹性散射和反应过程，变得越来越重要。在许多情况，上述几类过程同时存在并且相互耦合。这是一个非常复杂的过程，必须借助合理近似以简化问题，才能得到一些定量的结果。幸好，无论是原子，还是原子核，其内部不同的运动模式都有各自的能标，即特征能量尺度。不同的运动模式其特征能量尺度常常相差很大。例如，分子和原子核的转动，振动以及单粒子激发，它们的能标从小到大依次排列，彼此差别很大。因此，对于一定的碰撞能量 $E$，其激发能比碰撞能 $E$ 大很多的运动模式就不可能激发，因而被冻结起来。因此，随着碰撞能量从小到大逐步增加，内部运动的 (相应的自由度) 解冻是逐步进行的。在低能碰撞中，弹性散射和少数内部自由度 (粒子) 参与的反应过程是主要的，这时，平均场理论就是一个很好的近似，这就是碰撞问题中的光学模型，成为碰撞理论的基础和出发点。

### 3.7.2　光学模型

光学模型是建立在低能碰撞的平均场理论的基础之上的，它基于粒子作为物质波与光波的类比而引入。入射粒子 de Broglie 波在靶粒子附近的传播，类似于光波在一块不均匀介质中的传播；粒子的弹性散射类似于光的折射；反应过程中入射粒子 (或其特性) 的消失类似于光在介质中被吸收。光学模型中的势场有实部、虚部，$U(\vec{r}) = V(\vec{r}) + \mathrm{i}W(\vec{r})$，与之对应的光学介质的折射系数也有实部与虚

部，$n(\vec{r}) = n_r(\vec{r}) + \mathrm{i}n_i(\vec{r})$。实部决定散射与折射过程，虚部决定吸收过程。这一直观的物理模型得到十分有用的结果，这一问题将在第 6 章中详细介绍。

# 参 考 文 献

[1] Fetter A L, Walecka J D. Quantum Theory of Many-Particle System. New York：Mc Graw-Hill, 1971.

[2] Hartree D R. Proc Cam Phil Soc, 1928, 24：89.

[3] Fock V. Z. Phys, 1930, 61：209.

[4] Loewdin P O. Quantum Theory of Atoms, Molecles and the Solid State. New York：Academic Press, 1966.

[5] 徐躬耦，杨亚天. 原子核理论 (核结构与核衰变部分). 北京: 高等教育出版社, 1987.

[6] 谢希德, 陆栋. 固体能带论. 上海: 复旦大学出版社, 1998.

[7] 李正中. 固体理论. 2 版. 北京: 高等教育出版社, 2002.

[8] Hohenberg H, Kohn W. Phys Rev, 1964, B136：864.

[9] Kohn W, Sham L G. Phys Rev, 1965, A140：1133.

[10] Car K, Parrinello M. Phys Rev Lett, 1985, 55(22): 2471.

[11] Calvayrac F, Reinhard P G, Suraud E, et al. Phys Reps, 2000, 337：493-578.

[12] Calvayrac F, Reinhard P G, Suraud E. Phay Rev, 1995, B52：R 17506.

[13] Yabana K, Bertsch G F. Phys Rev, 1996, B54：4484.

[14] Calvayrac F, Reinhard P G, Suraud E. Ann Phys, 1997, 255：125.

[15] 徐躬耦, 王顺金. 原子核理论 (核反应部分). 北京: 高等教育出版社, 1992.

# 第 4 章　量子多体理论(Ⅱ)：剩余相互作用与二次量子化表象

本章从处理剩余相互作用的物理需要出发, 引进二次量子化表象, 阐述二次量子化表象的物理实质。然后简要介绍在二次量子化表象中，考虑剩余相互作用之后，对原子物理、原子核物理和凝聚态物理平均场理论的改进。

## 4.1　多粒子系统量子态用单粒子态描述

### 4.1.1　多粒子系统中的单粒子状态：剩余相互作用与单粒子态量子跃迁

第 3 章介绍的平均场近似是处理相互作用多体系统的零级近似。在这个近似下，系统的二体相互作用用单体平均场代替，每个粒子在整个系统的自洽平均场中运动，具有确定的量子状态，因而称为独立粒子运动。平均场近似导致独立粒子运动, 这是平均场近似的本质, 因此, 平均场近似又称为独立粒子近似。在平均场近似 (或独立粒子近似) 下, 对于费米子系统，多体系统的总的波函数是每个粒子的波函数的完全反对称化组合 (Slater 行列式)；对于玻色子系统，则是完全对称化组合 [1,2]。

费米子系统：

$$\begin{aligned}\varPhi_{\mathrm{F}}(1\cdots A) &= N_A \sum_p (-1)^p P(\varphi_1(1)\varphi_2(2)\cdots\varphi_A(A)) \\ &= \frac{1}{\sqrt{A!}}\left|\varphi_1(1)\varphi_2(2)\cdots\varphi_A(A)\right| \end{aligned} \tag{4-1}$$

玻色子系统：

$$\varPhi_{\mathrm{B}}(1\cdots A) = N_A \sum_p P(\varphi_1(1)\varphi_2(2)\cdots\varphi_A(A)) \tag{4-2}$$

$$\left(N_A = \sqrt{\frac{\prod n_i!}{A!}}, \sum_i n_i = A\right)$$

其中，$P$ 是一切可能的置换算符, $n_i$ 是填充 $\varphi_i$ 态的玻色子的数目。

然而，对于多体系统的正确描述的 Hamilton 量，应当包括平均场和剩余相互作用, 即

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V_{\mathrm{res}}$$

剩余相互作用 $V_{\mathrm{res}}$ 的主要效应是引起单粒子从一个量子态向另一个量子态的跃迁。因此, 包括剩余相互作用后, 对于费米子系统，系统总的波函数将不是一个 Slater 行列式，而是由许多由不同的单粒子量子态组态 $\{\ \alpha_1\quad \alpha_2\quad \cdots\quad \alpha_A\ \}$(组态, 即一组单粒子状态的集合的简称) 构成的 Slater 行列式的线性叠加 (称为组态混合，即许多单粒子量子组态的混合)，即

$$\varPsi(1\cdots A) = \sum_{\{\alpha_1\cdots\alpha_A\}} C\{\alpha_1\cdots\alpha_A\}\varPhi(\alpha_1\cdots\alpha_A) \tag{4-3}$$

对玻色子系统也一样，剩余相互作用也引起单粒子态的量子跃迁和系统总的波函数的组态混合。

因此，考虑剩余相互作用以后的量子多体理论, 必须描述多体系统中单粒子从一个量子态向另一个量子态的跃迁，以及计算力学量算符在两个不同的组态 $\varPhi(\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_A)$ 和 $\varPhi(\beta_1\beta_2\cdots\beta_A)$ 之间的矩阵元。在坐标表象中描述这一问题是可能的，但是非常繁杂的。为了简化问题，人们发展了二次量子化表象或粒子填充数表象，引进粒子的量子态的产生和消灭算符去描述多体系统中粒子从一个量子态向另一个量子态的跃迁。

平均场是单体算符，使得多体系统中每个粒子有确定的量子态, 造成多体系统用一个组态描述的独立粒子运动；剩余相互作用是二体算符，造成多体系统中每个粒子从一个量子态向另一个量子态的跃迁, 以及多体系统中许多组态的混合。简言之, 平均场 $\hat{H}_0$ 确定单粒子量子状态, 剩余相互作用 $V_{\mathrm{res}}$ 引起单粒子量子态跃迁。

### 4.1.2 单粒子量子态跃迁与单粒子量子态产生、消灭算符

考虑多体系统中最简单的两个组态的跃迁

$$\varPhi(\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha\cdots\alpha_A) \to \varPhi(\alpha_1\alpha_2\cdots\beta\cdots\alpha_A) \tag{4-4}$$

上述两个组态的跃迁引起的差别是有一个单粒子量子态从 $\varphi_\alpha$ 变为 $\varphi_\beta$。这一跃迁过程可以分两步进行：①量子态 $|\alpha\rangle = |\varphi_\alpha\rangle$ 的消失。②量子态 $|\beta\rangle = |\varphi_\beta\rangle$ 的产生。对于这两步过程可以引进单粒子量子态 $|\alpha\rangle$ 的消灭算符 $a_\alpha$ 和单粒子量子态 $|\beta\rangle$ 的产生算符 $a_\beta^+$。简单的逻辑思考和数学运算的需要告诉人们, 在这两步过程的中间，一定存在。③ 一个无粒子的量子状态，称为量子态真空或无粒子的状态 $|0\rangle$。

## 4.2　二次量子化表象

### 4.2.1　二次量子化表象的基本精神

如上所述，在量子力学多体问题中，二次量子化表象[1,2] 是针对坐标表象处理剩余相互作用的繁杂性而提出的简化方案。其主要精神如下：

(1) 省去单粒子量子态波函数 $\varphi_\alpha$ 的具体形式，只保留表征这个量子态的量子数 $\alpha$。

(2) 由于全同性原理，只有单粒子填充的量子态 $|\alpha\rangle$ 的量子数 $\alpha$ 是重要的，至于哪个粒子填充这个态是不可观测的，因而粒子坐标的编号是不重要的，可以省去的。其结果是只知道 $A$ 个粒子填充 $A$ 个量子态, 而不能区分哪个粒子填充哪个态, 这正是全同性原理的恰当体现。因此，在二次量子化表象中，粒子坐标消失了，只剩下被粒子填充的那些量子态的量子数。

(3) 用单粒子量子态的产生和消灭算符 $a_\beta^+$ 和 $a_\alpha$ 去描述粒子从一个态 $|\alpha\rangle = |\varphi_\alpha\rangle$ 向另一个态 $|\beta\rangle = |\varphi_\beta\rangle$ 的跃迁，运算的需要要求, 其间必须存在一个没有粒子的真空态 $|0\rangle$。

(4) 用许多单粒子态的产生算符作用于真空态去描述一个多体系统的组态

$$\varPhi(\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_A) \to a_{\alpha_1}^+ a_{\alpha_2}^+ \cdots a_{\alpha_A}^+ |0\rangle. \tag{4-5}$$

(5) 相应地，把力学量算符用量子态的产生和消灭算符表示出来，单粒子态波函数的信息包含在力学量的矩阵元中，这些矩阵元由客观性 (表象无关性) 原则，即力学量算符在坐标表象和在二次量子化表象中的矩阵元应当相等去确定。

### 4.2.2　Bose 系统

二次量子化表示法在一维谐振子问题中已经碰到过，一般的二次量子化表象只不过是它的推广。考虑一维谐振子的二次量子化表象，其 Hamilton 量为

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}P^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \tag{4-6}$$

引进声子产生和消灭算子

$$b^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x - \mathrm{i}\frac{\hat{p}}{\sqrt{m\omega\hbar}}\right) \tag{4-7a}$$

$$b = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x + \mathrm{i}\frac{\hat{p}}{\sqrt{m\omega\hbar}}\right) \tag{4-7b}$$

由 $[x,\hat{p}]$ 的对易子 $[x,\hat{p}] = \mathrm{i}\hbar$，可得 $\{b,b^+\}$ 的对易关系

$$[b,b^+] = 1,\quad [b,b] = [b^+,b^+] = 0 \tag{4-8}$$

其逆变换为

$$x=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(b^{+}+b),\quad \hat{p}=\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\mathrm{i}(b^{+}-b) \tag{4-9}$$

在声子表象中

$$\hat{H}=\left(b^{+}b+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{4-10}$$

谐振子基态

$$\varphi_0(x)=\sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2/2},\quad \alpha=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \tag{4-11}$$

对应于声子真空态

$$|0\rangle=|\varphi_0(x)\rangle \tag{4-12a}$$

用 $b$ 的表达式，易证

$$b|0\rangle=0 \tag{4-12b}$$

这表明 $b$ 是声子消灭算子，$|0\rangle$ 是没有声子的状态。

不难证明 $\varphi_n(x)$

$$\varphi_n(x)=\sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n n!}}\mathrm{e}^{\frac{-\alpha^2x^2}{2}}H_n(\alpha x) \tag{4-13}$$

对应于 $n$ 个声子的状态 $|n\rangle$

$$|n\rangle=\frac{1}{\sqrt{n!}}(b^{+})^n|0\rangle \tag{4-14}$$

运用 $b,b^{+}$ 的对易关系，可证，$\hat{n}=b^{+}b$ 是声子数算子, 满足

$$\begin{aligned}&[\hat{n},b]=-b,\\&[\hat{n},b^{+}]=+b^{+}\end{aligned} \tag{4-15}$$

和

$$\begin{aligned}&\hat{n}|n\rangle=n|n\rangle\\&b^{+}|n\rangle=\sqrt{n+1}|n+1\rangle\\&b|n\rangle=\sqrt{n}|n-1\rangle\end{aligned} \tag{4-16}$$

这样，完成了一维谐振子问题的二次量子化表示。现总结坐标表象与二次量子化表象的对应如下：

$$\begin{aligned}&\varphi_o(x)\to|0\rangle\\&\varphi_n(x)\to|n\rangle\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}&\{x,\hat{p}\}\rightarrow\{b,b^{+}\}\\&[x,\hat{p}]=\mathrm{i}\hbar\rightarrow[b,b^{+}]=1\\&\hat{O}(x,\hat{p})\rightarrow\hat{O}(b,b^{+})\end{aligned}\tag{4-17}$$

推广到三维谐振子

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2+\hat{p}_z^2)+\frac{1}{2}m(\omega_x^2x^2+\omega_y^2y^2+\omega_z^2z^2)\tag{4-18}$$

$$\begin{aligned}&\varphi_0(x,y,z)=\varphi_0(x)\varphi_0(y)\varphi_0(z)\rightarrow|0\rangle=|0,0,0\rangle=\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{3/2}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2(x^2+y^2+z^2)}\\&\varphi_{n_xn_yn_z}\rightarrow|n_xn_yn_z\rangle=\frac{1}{\sqrt{n_x!n_y!n_z!}}(b_x^{+})^{n_x}(b_y^{+})^{n_y}(b_z^{+})^{n_z}|0\rangle\end{aligned}\tag{4-19}$$

$$\begin{aligned}[x_i,\hat{p}_j]=&\mathrm{i}\hbar\delta_{ij}\rightarrow[b_i,b_j^{+}]=\delta_{ij}\\&\hat{O}(x_i,\hat{p}_i)\rightarrow\hat{O}(b_i,b_i^{+})\end{aligned}\tag{4-20}$$

由于

$$\langle n_x+1,n_y-1,n_z|b_x^{+}b_y|n_xn_yn_z\rangle=\sqrt{n_x+1}\sqrt{n_y}\tag{4-21}$$

可见，$b_x^{+}b_y$ 是从量子态 $|n_xn_yn_z\rangle$ 向量子态 $|n_x+1,n_y-1,n_z\rangle$ 跃迁的算子，它是通过消灭一个 $y$-声子，产生一个 $x$-声子来实现的。

对于一般玻色子系统，对于单粒子量子态 $\varphi_\alpha$，可以引进单粒子量子态产生算符 $b_\alpha^{+}$ 和消灭算符 $b_\alpha$，作用于真空 $|0\rangle$ 态后，有如下对应：

$$\begin{aligned}\varphi_\alpha=|\varphi_\alpha\rangle\rightarrow b_\alpha^{+}|0\rangle\\\varphi_\alpha^{*}=\langle\varphi_\alpha|\rightarrow\langle0|b_\alpha\end{aligned}\tag{4-22}$$

$b_\alpha,b_\beta^{+}$ 满足下列对易关系：

$$[b_\alpha,b_\beta^{+}]=\delta_{\alpha\beta},[b_\alpha,b_\beta]=[b_\alpha^{+},b_\beta^{+}]=0\tag{4-23}$$

上述对易关系式 (4-23) 规定了两项内容：①$b_\alpha^{+}$ 是产生算符，$b_\alpha$ 是消灭算符；②玻色子多体系统对于两个量子态的交换 (等价于两个粒子坐标的交换) 是对称的 (因为 $b_\alpha^{+}b_\beta^{+}=b_\beta^{+}b_\alpha^{+}$)，即把玻色子系统的统计法则纳入了对易关系。简言之, 式 (4-23) 的第一个式子规定了 $b_\alpha^{+}$ 是产生算符，$b_\alpha$ 是消灭算符, 而第二个式子规定了统计法则：粒子交换的对称性。

对于多体系统的状态，可以用相应单粒子量子态的产生算符作用于真空态而获得

$$\begin{aligned}\varPhi_S(\alpha\beta\gamma\delta\cdots)\rangle\rightarrow b_\alpha^{+}b_\beta^{+}b_\gamma^{+}b_\delta^{+}\cdots|0\rangle\\\langle\varPhi_S(\alpha\beta\gamma\delta\cdots)|\rightarrow\langle0|\cdots b_\delta b_\gamma b_\beta b_\alpha\end{aligned}\tag{4-24}$$

下标 $S$ 表示完全对称化。上述二次量子化表象的波函数显然对任意两个单粒子量子态的交换是对称的。

若同一量子态 $\alpha_i$ 填充了 $n_i$ 个粒子，则多体系统的状态也可以用填充数的 $n_i$ 的集合来表示，即

$$\begin{aligned}&|n_1 n_2 \cdots n_i \cdots n_A\rangle, \quad n_i = 0,1,2\cdots \\ &= (b_1^+)^{n_1}(b_2^+)^{n_2}...(b_i^+)^{n_i}...(b_A^+)^{n_A}|0\rangle\end{aligned} \tag{4-25}$$

可以证明 $\hat{n}_i = b_i^+ b_i$ 是粒子数算子, 满足

$$[\hat{n}_i, b_j] = -b_i\delta_{ij}, \quad [\hat{n}_i, b_j^+] = b_i^+\delta_{ij} \tag{4-26a}$$

和

$$\hat{n}_i|n_1 n_2 \cdots n_i \cdots n_A\rangle = n_i|n_1 n_2 \cdots n_i \cdots n_A\rangle \tag{4-26b}$$

而产生算子 $b_i^+$ 和消灭算子 $b_i$ 作用规则如下：

$$b_i^+|n_1 n_2 \cdots n_i \cdots n_A\rangle = \sqrt{n_i+1}|n_1 n_2 \cdots n_i + 1 \cdots n_A\rangle \tag{4-27a}$$

$$b_i|n_1 n_2 \cdots n_i \cdots n_A\rangle = \sqrt{n_i}|n_1 n_2 \cdots n_i - 1 \cdots n_A\rangle \tag{4-27b}$$

力学量算子的二次量子化表示。因为一元型力学量 $\hat{O}^{(1)}(\vec{r})$ 只涉及一个粒子的坐标，因而只能引起一个粒子从任意一个量子态向另一个量子态的跃迁，故其二次量子化表示应为单粒子量子态的跃迁算符 $b_\alpha^+ b_\beta$ 的线性叠加

$$\hat{O}^{(1)}(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{A} \hat{h}(i) \rightarrow \hat{O}(1) = \sum_{\alpha\beta} O_{\alpha\beta}^{(1)} b_\alpha^+ b_\beta \tag{4-28a}$$

二元型力学量 $\hat{O}^{(2)}(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$ 涉及两个粒子的坐标，要引起两个粒子的量子态的跃迁，故应是两个粒子的量子态的跃迁算符 $b_\alpha^+ b_\beta^+ b_\delta b_\gamma$ 的线性叠加

$$\hat{O}^{(2)}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}^{A} v(ij) \rightarrow \hat{O}(2) = \frac{1}{4}\sum_{\alpha\beta\gamma\delta} O_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(2)} b_\alpha^+ b_\beta^+ b_\delta b_\gamma \tag{4-28b}$$

线性叠加系数即表示的矩阵元 $O_{\alpha\beta}^{(1)}$ 和 $O_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(2)}$, 要由力学量的矩阵元与表象无关 (客观性原则) 来确定：在坐标表象的矩阵元应等于在相应的二次量子化表象的矩阵元。因为二次量子化表象实用于任意多个粒子的系统, 自然包括一个和两个粒子的系统。对于一元型力学量, 比较一个粒子的系统中一元型力学量在两种表象中的矩阵元, 就可以确定二次量子表象的矩阵元 $O_{\alpha\beta}^{(1)}$; 对于二元型力学量, 比较两个粒子的系统中二元型力学量在两种表象中的矩阵元, 就可以确定二次量子表象的矩阵元

$O^{(2)}_{\alpha\beta\gamma\delta}$。对于一个粒子的系统，两种表象中状态基矢的对应为 $|\varphi_\alpha(\vec{r})\rangle \leftrightarrow |\alpha\rangle$, 一元型力学量 $\hat{O}^{(1)}(\vec{r}) = \hat{h}(\vec{r})$ 在两种表象的状态基矢中的矩阵元相等给出 $O^{(1)}_{\alpha\beta}$ 的表示

$$\langle\varphi_\alpha|\hat{h}(\vec{r})|\varphi_\beta\rangle = \langle\alpha|\hat{O}(1)|\beta\rangle = O^{(1)}_{\alpha\beta} \tag{4-29}$$

对于两个粒子的系统，两种表象中状态基矢的对应为 $|\varPhi_{\alpha\beta}(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\rangle \leftrightarrow |\alpha\beta\rangle$, 其中，

$$\varPhi(\alpha\beta) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_\alpha(1)\varphi_\beta(2) + \varphi_\alpha(2)\varphi_\beta(1)]$$

二元型力学量 $\hat{O}^{(2)}(\vec{r}_1\vec{r}_2) = v(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$ 在两种表象中的状态基矢中的矩阵元相等给出 $O^{(2)}_{\alpha\beta\gamma\delta}$ 的表示。由

$$\left\langle \varPhi(\alpha\beta)|\hat{O}^{(2)}(r_1r_2)|\varPhi(\alpha'\beta')\right\rangle = \left\langle\alpha\beta|\hat{O}(2)|\alpha'\beta'\right\rangle \tag{4-30}$$

得

$$\frac{1}{2}[\langle\varphi_\alpha\varphi_\beta|\hat{v}|\varphi_\delta\varphi_\gamma\rangle + \langle\varphi_\alpha\varphi_\beta|\hat{v}|\varphi_\gamma\varphi_\delta\rangle] = \frac{1}{2}O^{(2)}\alpha\beta\gamma\delta \tag{4-31}$$

因此

$$\hat{O}(1) = \sum_{\alpha\beta}\langle\varphi_\alpha|\hat{h}|\varphi_\beta\rangle b^+_\alpha b_\beta \tag{4-32a}$$

$$\hat{O}(2) = \frac{1}{4}\sum_{\alpha\beta\gamma\delta}(\langle\varphi_\alpha\varphi_\beta|\hat{v}|\varphi_\delta\varphi_\gamma\rangle + \langle\varphi_\alpha\varphi_\beta|\hat{v}|\varphi_\gamma\varphi_\delta\rangle)b^+_\alpha b^+_\beta b_\delta b_\gamma \tag{4-32b}$$

上述算符的二次量子化表示，对 $A$ 个玻色子的波函数也成立。假定系统的波函数 $\varPhi_s = \varPhi_s(\alpha\beta\gamma\delta\cdots)$ 有 $A$ 个不同的单粒子状态，则在坐标表象式 (4-28a) 和式 (4-28b) 的矩阵元为

$$\left\langle \varPhi_s(\alpha\beta\gamma\delta\cdots)|\hat{O}^{(1)}(r)|\varPhi_s(\alpha'\beta\gamma\delta\cdots)\right\rangle = \frac{1}{A!}(A-1)!\sum_i\langle\varphi_\alpha|\hat{h}|\varphi'_\alpha\rangle = \langle\varphi_\alpha|\hat{h}|\varphi'_\alpha\rangle$$

$$\begin{aligned}&\langle\varPhi_s(\alpha\beta\gamma\delta\cdots)|\hat{O}^{(2)}(rr)|\varPhi_s(\alpha'\beta'\gamma\delta\cdots)\rangle\\ =&\frac{1}{A!}(A-2)!\sum_{i\neq j}\left\langle\varphi_\alpha\varphi_\beta|v(ij)|\varphi_{\alpha'}\varphi_{\beta'}\right\rangle + \left\langle\varphi_\alpha\varphi_\beta|v(ij)|\varphi_{\beta'}\varphi_{\alpha'}\right\rangle\\ =&\left\langle\varphi_\alpha\varphi_\beta|v|\varphi_{\alpha'}\varphi_{\beta'}\right\rangle + \left\langle\varphi_\alpha\varphi_\beta|v|\varphi_{\beta'}\varphi_{\alpha'}\right\rangle\end{aligned} \tag{4-33a}$$

在二次量子化表象的矩阵元为

$$\left\langle\alpha\beta\gamma\delta\cdots|\hat{O}(1)|\alpha'\beta\gamma\delta\cdots\right\rangle = O^{(1)}_{\alpha\beta} = \left\langle\varphi_\alpha|\hat{h}|\varphi_{\alpha'}\right\rangle$$

$$\langle(\alpha\beta\gamma\delta\cdots)|\hat{O}(2)|(\alpha'\beta'\gamma\delta\cdots)\rangle$$

$$=O^{(2)}_{\alpha\beta\alpha'\beta'} = \langle\varphi_\alpha\varphi_\beta|v|\varphi_{\alpha'}\varphi_{\beta'}\rangle + \langle\varphi_\alpha\varphi_\beta|v|\varphi_{\beta'}\varphi_{\alpha'}\rangle \tag{4-33b}$$

它们显然相等，坐标表象与二次量子化表象是等价的, 给出同一物理结果。

从算子的坐标表象到二次量子化表象的变换表明：

(1) 在坐标表象中对粒子坐标的求和，在二次量子化表象中相应于对单粒子量子态的求和。

(2) 计算矩阵元时，由于全同性原理，在坐标空间无论哪个粒子，只要它占据的量子态相同，都给出相同的矩阵元 (粒子坐标不过是矩阵元积分计算中的哑变量)，所以，建立在矩阵元相等基础上的二次量子化表象不计粒子坐标而只计粒子的量子态，对粒子坐标求和变成了对粒子量子态求和。

求得一元型和二元型力学量算符的二次量子化表示之后，就可以把 Hamilton 量从坐标表象变到二次量子化表象：

$$\hat{H}(r) = \sum_{i=1}^{k}\hat{h}(i) + \frac{1}{2}\sum_{ij}v(ij) \rightarrow$$

$$\hat{H} = \sum_{\alpha\beta}\langle\alpha|\hat{h}|\beta\rangle b^+_\alpha b_\beta + \frac{1}{4}\sum_{\alpha\beta\gamma\delta}\langle\alpha\beta|v|\gamma\delta+\delta\gamma\rangle b^+_\alpha b^+_\beta b_\delta b_\gamma \tag{4-34a}$$

$$\langle\alpha\beta|v|\gamma\delta+\delta\gamma\rangle = \langle\varphi_\alpha\varphi_\beta|v|\varphi_\delta\varphi_\gamma+\varphi_\gamma\varphi_\delta\rangle \tag{4-34b}$$

应当指出, 对于谐振子，在坐标与动量算子的层次上引进了 $b^+, b$；对于一般情况，在量子态 $\varphi_\alpha$ 的层次引进 $b^+, b$。

这样，从剩余相互作用要引起单粒子量子态跃迁的物理事实出发，为了简化问题，引进了单粒子量子态的产生和消灭算符以及逻辑上所要求的真空态，通过规定产生、消灭算子的对易关系，赋予了这些算子以下的性质：①$b^+_\alpha, b_\alpha$ 具有产生，消灭量子态 $\varphi_\alpha$ 的性质;②对玻色子系统, $b^+_\alpha(b_\alpha)$ 具有交换对称的性质。从而把玻色子多体系统完全对称的状态波函数和力学量算符, 用产生、消灭算子表示出来。二次量子化表象对于坐标表象而言，不仅是表象变换，而且把多体系统的全同性和统计法则通过对易关系式纳入到产生、消灭算子的性质之中，$b^+, b$ 不仅是单粒子量子态的产生、消灭算子，而且是具有交换对称性的玻色子的产生、消灭算子。因此，二次量子化表象是描述量子多体系统的有力工具。

### 4.2.3　费米子系统

对于费米子系统，可以类似地建立起二次量子化表象。单粒子态矢对应如下：

$$\begin{aligned}&|\text{真空无粒子态}\rangle \rightarrow |0\rangle\\&\psi_\alpha = |\psi_\alpha\rangle \rightarrow a^+_\alpha|0\rangle\\&\psi^*_\alpha = \langle\psi_\alpha| \rightarrow \langle 0|a_\alpha\end{aligned} \tag{4-35}$$

因为对于全同费米子系统, 交换任意两个粒子的坐标, 波函数是反对称的，所以规定 $a_\alpha, a_\alpha^+$ 的算子关系必须是反对易关系，由此规定 $a_\alpha, a_\alpha^+$ 的运算性质和统计性质如下：

$$\begin{aligned}\{a_\alpha, a_\beta^+\} &= a_\alpha a_\beta^+ + a_\beta^+ a_\alpha = \delta_{\alpha\beta} \\ \{a_\alpha, a_\beta\} &= \{a_\alpha^+, a_\beta^+\} = 0\end{aligned} \tag{4-36}$$

式 (4-36) 的第一排式子规定了 $\{a_\alpha, a_\alpha^+\}$ 分别是单粒子量子态消灭算符和产生算符, 而第二排式子规定了统计法则：不同状态的产生 (消灭) 算符交换是反对称的 —— 粒子服从 Fermi 统计法则。

多体系统的状态对应为

$$\begin{aligned}\varPhi_A &= |\varPhi_A(\alpha\beta\gamma\delta\cdots)\rangle \to a_\alpha^+ a_\beta^+ a_\gamma^+ a_\delta^+ \cdots |0\rangle \\ \varPhi_A^* &= \langle \varPhi_A(\alpha\beta\gamma\delta\cdots)| \to \langle 0| \cdots a_\delta a_r a_\beta a_\alpha\end{aligned} \tag{4-37}$$

下标 $A$ 表示完全反对称化。多体系统的 Hamilton 量在坐标表象和二次量子化表象中的对应为

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \sum_{i=1}^{A} h(i) + \frac{1}{2}\sum_{i=j} v(ij) \\ \to \hat{H} &= \sum_{\alpha\beta} \langle\alpha|\hat{h}|\beta\rangle a_\alpha^+ a_\beta + \frac{1}{4}\sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle\alpha\beta|v|\gamma\delta - \delta\gamma\rangle a_\alpha^+ a_\beta^+ a_\delta a_\gamma\end{aligned} \tag{4-38a}$$

其中，

$$\begin{aligned}\langle\alpha|\hat{h}|\beta\rangle &= \langle\psi_\alpha|\hat{h}|\psi_\beta\rangle \\ \langle\alpha\beta|v|\gamma\delta - \delta\gamma\rangle &= \langle\psi_\alpha\psi_\beta|v|\psi_\gamma\psi_\delta - \psi_\delta\psi_\gamma\rangle\end{aligned} \tag{4-38b}$$

同样可以证明，力学量算符的矩阵元在坐标表象和在二次量子表象中计算的结果是相同的 (表象无关性或客观性原理)。

由 $a_\alpha^+$, $a_\alpha$ 的对易关系可知

$$(a_\alpha^+)^n = 0, (n \geqslant 2) \tag{4-39}$$

这表明，一个量子态 $\alpha$ 不能填充 1 个以上的粒子 (Pauli 原理)。由 $a_\alpha^+ a_\beta^+ = -a_\beta^+ a_\alpha^+$ 可知

$$|\alpha\beta\gamma\delta\cdots\rangle = -|\beta\alpha\gamma\delta\cdots\rangle \tag{4-40}$$

即多体系统的波函数是完全反对称化的，因此 $\{a_\alpha^+, a_\beta^+\} = 0$ 表现了费米子系统的统计法则。多体系统波函数也可以用填充数 $n_\alpha$ 表示：

$$|\alpha\beta\gamma\delta\cdots\rangle = |n_\alpha n_\beta n_\gamma n_\delta \cdots n_A\rangle \tag{4-41}$$

由于 Pauli 原理

$$n_\alpha = 0 \quad \text{或} \quad 1 \tag{4-42}$$

粒子数算子

$$\hat{n}_\alpha = a_\alpha^+ a_\alpha \tag{4-43}$$

满足

$$\begin{aligned} &[\hat{n}_\alpha, a_\beta] = -a_\alpha \delta_{\alpha\beta} \\ &[\hat{n}_\alpha, a_\beta^+] = +a_\alpha \delta_{\alpha\beta} \end{aligned} \tag{4-44}$$

$$\begin{aligned} &\hat{n}_\alpha |n_\alpha n_\beta n_\gamma n_\delta \cdots\rangle = n_\alpha |n_\alpha n_\beta n_\gamma n_\delta \cdots n_A\rangle \\ &a_\alpha^+ |n_\alpha n_\beta n_\gamma n_\delta \cdots\rangle = \sqrt{1-n_\alpha} |n_\alpha + 1, n_\beta n_\gamma n_\delta \cdots\rangle \\ &a_\alpha |n_\alpha n_\beta n_\gamma n_\delta \cdots\rangle = \sqrt{n_\alpha} |n_\alpha - 1, n_\beta n_\gamma n_\delta \cdots\rangle \end{aligned} \tag{4-45}$$

$$\begin{aligned} a_\alpha^+ a_\alpha |n_\alpha n_\beta n_\gamma n_\delta \cdots\rangle &= \sqrt{1-(n_\alpha - 1)} \sqrt{n_\alpha} |n_\alpha n_\beta n_\gamma n_\delta \cdots\rangle \\ &= \sqrt{(2-n_\alpha) n_\alpha} |n_\alpha n_\beta \cdots\rangle \\ &= n_\alpha |n_\alpha n_\beta n_\gamma n_\delta \cdots\rangle \end{aligned} \tag{4-46}$$

这样得到费米子系统的二次量子化表象，给出了状态和力学量之间的一个完全的对应。

小结

建立二次量子化表象的思路：

① 剩余作用引起单粒子量子态跃迁；② 用单粒子量子态的产生、消灭算符和真空态描述这种跃迁；③ 产生、消灭算符 $a_\alpha^+, a_\beta$ 的对易关系不但规定了它们作为粒子的量子态的产生、消灭算符的性质，而且反映了全同性原理和统计法则。因此，二次量子化表象是包含了全同性原理和统计法则这一普遍物理规律的表象变换。

### 4.2.4 量子多体系统二次量子化表象的场论形式

上述二次量子化表象是量子多体系统坐标空间表示的简化，通过单粒子量子态的产生和消灭算子的对易关系把全同性原理和统计法则包括了进去。简化所抽掉的最重要的信息是单粒子量子态在坐标空间的波函数。如果把这个抽掉的信息恢复起来，则得到对量子多体系统的完全、无信息遗漏的描述。这就是量子多体系统二次量子化表象的场论形式。

1. 费米子系统的场论表示

引进费米子量子态振幅算子 (费米子场算子)

$$\hat{\psi}(x)^+ = \sum_\alpha a_\alpha^+ \psi_\alpha^*(x) \tag{4-47a}$$

$$\hat{\psi}(x) = \sum_{\alpha} a_{\alpha} \psi_{\alpha}(x) \tag{4-47b}$$

通过 $a_{\alpha}, a_{\alpha}^{+}$ 的反对易关系和 $\psi_{\alpha}$ 的正交归一和完备性，可得 $\hat{\psi}(x), \hat{\psi}^{+}(x')$ 反对易关系

$$\begin{aligned} \{\hat{\psi}(x), \hat{\psi}^{+}(x')\} &= \sum \{a_{\alpha}, a_{\beta}^{+}\} \psi_{\alpha}^{*}(x') \psi_{\beta}(x) \\ &= \sum_{\alpha} \psi_{\alpha}(x) \psi_{\alpha}^{*}(x') \\ &= \delta(x - x') \end{aligned} \tag{4-48}$$

$$\{\hat{\psi}(x), \hat{\psi}(x')\} = \{\hat{\psi}^{+}(x), \hat{\psi}^{+}(x')\} = 0$$

式中第三个等式来自 $\psi_{\alpha}$ 的完备性。在这个表示中，系统的 Hamilton 量算子的表示为

$$\begin{aligned} \hat{H} =& \sum_{\alpha\beta} \int \psi_{\alpha}^{*}(x) \hat{h}(x) \psi_{\beta}(x) \mathrm{d}x a_{\alpha}^{+} a_{\beta} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \iint \psi_{\alpha}^{*}(x_1) \psi_{\beta}^{*}(x_2) v(x_1 - x_2) \psi_{\delta}(x_2) \psi_{\gamma}(x_1) \mathrm{d}x_1 \mathrm{d}x_2 a_{\alpha}^{+} a_{\beta}^{+} a_{\delta} a_{\lambda} \\ =& \int \hat{\psi}^{+}(x) \hat{h}(x) \hat{\psi}(x) \mathrm{d}x + \frac{1}{2} \int \hat{\psi}^{+}(x_1) \hat{\psi}^{+}(x_2) v(x_1 - x_2) \hat{\psi}(x_2) \hat{\psi}(x_1) \mathrm{d}x_1 \mathrm{d}x_2 \end{aligned} \tag{4-49}$$

其他物理量算符有类似的表示。对动量算符和粒子数算符, 有

$$\begin{aligned} \hat{P} &= \int \hat{\psi}^{+}(x)(-\mathrm{i}\hbar\vec{\nabla})\hat{\psi}(x)\mathrm{d}x \\ \hat{N} &= \int \hat{\psi}^{+}(x)\hat{\psi}(x)\mathrm{d}x \end{aligned} \tag{4-50}$$

2. 玻色子系统的场论表示

引进玻色子量子态振幅算子 (玻色子场算符)

$$\begin{aligned} \hat{\varphi}^{+}(x) &= \sum_{\alpha} b_{\alpha}^{+} \varphi_{\alpha}^{*}(x) \\ \hat{\varphi}(x) &= \sum_{\alpha} b_{\alpha} \varphi_{\alpha}(x) \end{aligned} \tag{4-51}$$

通过 $b_{\alpha}, b_{\alpha}^{+}$ 的对易关系和 $\varphi_{\alpha}$ 的正交、归一和完备性，可得

$$\begin{aligned} [\hat{\varphi}(x), \hat{\varphi}^{+}(x')] &= \sum_{\alpha\beta} [b_{\alpha}, b_{\beta}^{+}] \varphi_{\alpha}(x) \varphi_{\beta}^{*}(x') \\ &= \sum_{\alpha} \varphi_{\alpha}(x) \varphi_{\alpha}^{*}(x') \end{aligned}$$

$$= \delta(x - x') \tag{4-52a}$$

$$[\hat{\varphi}(x), \hat{\varphi}(x')] = [\hat{\varphi}^+(x), \hat{\varphi}^+(x')] = 0 \tag{4-52b}$$

式中第三个等式来自 $\varphi_\alpha$ 的完备性。

系统的 Hamilton 量算子的表示为

$$\begin{aligned}\hat{H} = &\sum_{\alpha\beta} \int \varphi_\alpha^*(x)\hat{h}(x)\varphi_\beta(x)\mathrm{d}x b_\alpha^+ b_\beta \\ &+ \frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta} \iint \mathrm{d}x_1 \mathrm{d}x_2 \varphi_\alpha^*(x_1)\varphi_\beta^*(x_2)v(x_1 - x_2)\varphi_\delta(x_2)\varphi_\gamma(x_1)b_\alpha^+ b_\beta^+ b_\delta b_\gamma \\ = &\int \hat{\varphi}^+(x)\hat{h}(x)\hat{\varphi}(x)\mathrm{d}x + \frac{1}{2}\iint \mathrm{d}x_1 \mathrm{d}x_2 \hat{\varphi}^+(x_1)\hat{\varphi}^+(x_2)v(x_1 - x_2)\hat{\varphi}(x_2)\hat{\varphi}(x_1)\end{aligned} \tag{4-53}$$

对动量算符和粒子数算符, 有

$$\begin{aligned}\hat{P} &= \int \mathrm{d}x \hat{\varphi}^+(x)(-\mathrm{i}\hbar\vec{\nabla})\hat{\varphi}(x) \\ \hat{N} &= \int \hat{\varphi}^+(x)\hat{\varphi}(x)\mathrm{d}x\end{aligned} \tag{4-54}$$

在场论表示中，波函数的表达式仍为

$$\begin{aligned}|\alpha\beta\gamma\delta\cdots\rangle_{\mathrm{F}} &= a_\alpha^+ a_\beta^+ a_\gamma^+ a_\delta^+ \cdots |0\rangle \\ |\alpha\beta\gamma\delta\cdots\rangle_{\mathrm{B}} &= b_\alpha^+ b_\beta^+ b_\gamma^+ b_\delta^+ \cdots |0\rangle\end{aligned} \tag{4-55}$$

显然, 场算符与波函数有下述关系

$$\begin{aligned}{}_F\langle 0|\hat{\psi}(x)|\alpha\rangle_{\mathrm{F}} &= \psi_\alpha(x) \\ {}_B\langle 0|\hat{\varphi}(x)|\alpha\rangle_{\mathrm{B}} &= \varphi_\alpha(x)\end{aligned} \tag{4-56}$$

即单粒子态波函数是场算符 $\hat{\psi}(x)$ [$\hat{\varphi}(x)$] 在一个粒子态 $|\alpha\rangle$ 与真空态 $|0\rangle$ 之间的跃迁振幅。进而有

$$\begin{aligned}\langle\alpha|\hat{\psi}^+(x)\hat{\psi}(x)|\alpha\rangle &= \psi_\alpha^*(x)\psi_\alpha(x) = \rho_\alpha^{\mathrm{F}}(x) \\ \langle n_\alpha|\hat{\varphi}^+(x)\hat{\varphi}(x)|n_\alpha\rangle &= n_\alpha\varphi_\alpha^*(x)\varphi_(x) = \rho_\alpha^{\mathrm{B}}(x)\end{aligned} \tag{4-57}$$

可知 $\hat{\psi}^+(x)\hat{\psi}(x)$ 是费米子场的密度算符, $\hat{\varphi}^+(x)\hat{\varphi}(x)$ 是玻色子场的密度算符。

### 3. 量子多体系统二次量子化表象的场论形式的特点

(1) 引进了场算符，它们由粒子的量子态产生或消灭算子乘以相应的量子态波函数 (或其复共轭) 后的线性叠加组成，是粒子态 Hilbert 空间的矢量算子，满足对易或反对易关系式。

(2) Hamilton 量 $\hat{H}$ 和力学量算子用场算符表达出来后，对粒子坐标编号和求和消失了，代以场算符展开式中对粒子的量子态完备基矢求和。这样的表达式包含了全同粒子的统计法则，适合描述粒子数目可变，以及粒子量子态之间存在跃迁的量子多体系统。这正体现出场论系统中粒子产生、湮灭和粒子数可变的特点。

(3) 系统的态矢仍用单粒子量子态产生算符作用于真空态生成。

(4) 场算符是单粒子态 Hilbert 空间的矢量算符，它的展开虽然与完备的单粒子量子态基矢的选择无关，但应当选择尽可能接近物理真实的单粒子态基矢，通常选用各种近似程度下的平均场单粒子态基矢。

4. 与量子场论的一致性和差别

(1) 一致性。量子多体系统的场论形式表明，量子多体问题与量子场论是一致的。都是基于多体系统粒子数的可变性，单粒子量子态的跃迁与转变的可能性，以及全同性原理和统计法则。

(2) 差别。二者的差别在于，本章所讲的量子多体系统是非相对论性的，粒子态的产生、消灭算符只用来描述单粒子量子态的跃迁；而量子场论是相对论性的，具有 Lorentz 不变性，粒子态的产生、消灭算符不仅用来描述单粒子量子态的跃迁，而且描述粒子–反粒子从真空中的产生和湮灭，以及相对论效应和真空涨落效应。

(3) 回答一个问题。现在可以回答一个困难的问题：二次量子化究竟是表象变换还是物理原理？对谐振子问题，二次量子化是一个表象变换 (在 $x, \hat{p}$ 层次上的表象变换)，不涉及真实意义上的多粒子系统问题，但对同一类声子，已表现出多粒子系统的许多特点, 如声子的全同性和波函数对声子交换的对称性。

对一般多体系统，对描述粒子的量子态跃迁来说，是表象变换，但就包含全同性原理和统计法则而言，又是物理原理，因此它是一个把全同性原理和统计法则概括了进去的表象变换。

(4) 场论的二次量子化包含物理原理。把 Dirac 方程看作单电子运动的波动方程，是一次量子化。考虑多电子系统，把波函数变成场函数算符, 引进场函数算符的反对易关系, 从而纳入全同性原理和统计法则，Dirac 方程就变成场函数的算符方程, 多电子系统就成为量子场。这就是场论的二次量子化，包含了从单粒子量子理论过渡到多粒子量子场这一物理原理。

下面介绍考虑剩余相互作用之后，对原子物理、原子核物理和凝聚态平均场理论的改进。

## 4.3 原子核和原子的组态混合模型

原子核多体系统的 HF 平均场理论以及相应的壳层模型是很好的零级近似，它

的改进则需要考虑剩余相互作用以及由它引起的不同组态的混合 [3]。

设平均场近似下核子的量子态为 $\psi_\alpha$，相应的量子态的产生、消灭算符为 $a_\alpha^+, a_\alpha$，则原子核 Hamilton 量可以写成

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \sum_\alpha \varepsilon_\alpha a_\alpha^+ a_\alpha + \frac{1}{4}\sum_{\alpha\beta\gamma\delta}\langle\alpha\beta|v_{\text{res}}|r\delta - \delta\gamma\rangle a_\alpha^+ a_\beta^+ a_\delta a_\gamma \\ &= \int \hat{\psi}^+(x)\hat{h}(x)\hat{\psi}(x)\mathrm{d}x + \frac{1}{2}\iint \hat{\psi}^+(x_1)\hat{\psi}^+(x_2)v_{\text{res}}(x_1 - x_2)\hat{\psi}(x_2)\hat{\psi}(x_1)\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\end{aligned} \tag{4-58}$$

$v_{\text{res}}$ 为剩余相互作用，$\hat{h}(x)$ 为平均场单粒子 Hamilton 量，$\{\varepsilon_\alpha, \psi_\alpha\}$ 为 $\hat{h}$ 的本征解：

$$\hat{h}\psi_\alpha = \varepsilon_\alpha\psi_\alpha \tag{4-59}$$

场算符在此表象中展开

$$\hat{\psi}(x) = \sum_\alpha a_\alpha\psi_\alpha(x) \tag{4-60a}$$

$$\hat{\psi}^+(x) = \sum_\alpha a_\alpha^+\psi_\alpha^*(x) \tag{4-60b}$$

$\hat{H}$ 的本征态一般形式为

$$\Psi_n(1\cdots A) = \sum_{[\alpha_1\cdots\alpha_A]} C^n_{\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_A}\Phi(\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_A) \tag{4-61}$$

$\Phi(\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_A) = |\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_A\rangle$ 是由一组单粒子态 $\varphi_{\alpha_1}\varphi_{\alpha_2}, \cdots, \varphi_{\alpha_A}$ 组成的完全反对称态，每一个 $\Phi(\alpha_1, \alpha, \cdots, \alpha_A)$ 称为一个组态，$\Psi_n$ 是各种不同的组态 $\Phi(\alpha_1, \alpha, \cdots, \alpha_A)$ 的线性叠加，称为组态混合。

组态混合壳模型的任务就是选定物理上合理的单粒子态子空间，把上述 $\hat{H}$ 对角化，从而可求得剩余相互作用存在时原子核的本征解 (本征能量及其本征态波函数)。组态混合壳模型计算时的组态空间的维数是非常大的，常常超出计算机的能力。为了简化问题，通常把原子核的满壳层看作不参与内部激发的核心 (称核实)，即把满壳层内的核子的自由度冻结起来，只考虑满壳层外少数几个核子的运动, 这些参与相互作用和量子跃迁的核子称为价核子。选择一个适当的单粒子量子态的 Hilbert 子空间，然后在这个子空间内构造出价核子的多体波函数的组态空间，并在这个组态空间内求解 (把 $\hat{H}$ 对角化)。在 $\hat{H}$ 对角化求解中，必须在总角动量和宇称等守恒量子数确定的 $\hat{H}$ 的不变子空间内进行，这样可以减少工作的 Hilbert 空间的维数，减小计算量。

如果在剩余相互作用中只考虑极短程力如 $\delta(r_1 - r_2)$ 力，则可以简化成对力。引进从粒子表象到准粒子表象的幺正变换，在准粒子表象再做一次平均场近似，就可把对力的大部分效应包括进去，得到独立准粒子表象中的解。

顺便指出, 当代的原子核结构理论, 在精密实验的推动下, 已超越了平均场近似, 采取上述原子核结构的组态混合壳模型的思路, 在很大的组态空间处理剩余相互作用, 得到十分精确的结果。

现代原子结构理论也大大超越了平均场近似, 发展了类似于原子核结构的组态混合模型，原子物理学家把这种模型称为原子的组态相互作用理论。

## 4.4 固体物理中的几个模型

把固体看成理想晶体，求解了电子在晶格周期场和电子之间的 Coulomb 相互作用产生的自洽平均场中的独立粒子运动，从而得到能带论的解以后，就可以进一步考虑在平均场近似中略去的剩余相互作用的影响。对剩余相互作用的简化处理，产生了超越固体能带论 (超越平均场近似) 的几个重要模型理论[4−13]。下面给予简要的介绍。

### 4.4.1 固体的磁性与 Heisenberg 模型

考虑相邻两个格点上的离子各有一个 d 电子，计算它们之间的 Coulomb 相互作用能。这个两电子系统的波函数为

$$\psi(12) = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 - \hat{P}_r(12)\hat{P}_\sigma(12))\varphi_1(\vec{r}_1)\varphi_2(\vec{r}_2)\chi(12) \tag{4-62}$$

其中，$\varphi_1, \varphi_2$ 为电子的坐标空间波函数，$x(12)$ 是两个电子的自旋波函数，$\hat{P}_r(12)$, $\hat{P}_\sigma(12)$ 分别是空间坐标和自旋坐标的交换算符，定义为

$$\begin{aligned} &\hat{P}_r(12)[\varphi_1(\vec{r}_1)\varphi_2(\vec{r}_2)] = \varphi_1(\vec{r}_2)\varphi_2(\vec{r}_1) \\ &\hat{P}_\sigma(12)\chi(12) = \chi(21) \end{aligned} \tag{4-63}$$

显然 $\psi(12)$ 是反对称化的，设 $\hat{P}(12) = \hat{P}_r(12)\hat{P}_\sigma(12)$，则有

$$\hat{P}(12)\psi(12) = \hat{P}_r(12)\hat{P}_\sigma(12)\psi(12) = \psi(21) = -\psi(12) \tag{4-64}$$

计算这两个电子的 Coulomb 能

$$\begin{aligned} E_{12} &= \langle\psi(12)|\frac{\varepsilon \cdot e^2}{r_{12}}|\psi(12)\rangle \\ &= \int \varphi_1^*(1)\varphi_2^*(2)\frac{\varepsilon \cdot e^2}{r_{12}}\varphi_1(1)\varphi_2(2)\mathrm{d}\vec{r}_1\mathrm{d}\vec{r}_2\langle\chi(21)|\chi(21)\rangle \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&-\int \varphi_1^*(1)\varphi_2^*(2)\frac{\varepsilon\cdot e^2}{r_{12}}\varphi_1(2)\varphi_2(1)\mathrm{d}\vec{r}_1\mathrm{d}\vec{r}_2\langle\chi(21)|\hat{P}_\sigma(12)|\chi(21)\rangle \\
&= E_{\text{direct}} + E_{\text{ex}}
\end{aligned} \tag{4-65}
$$

$\varepsilon$ 为屏蔽效应。$E_{\text{direct}}$ 为势能的直接项，$E_{\text{ex}}$ 为交换项，如果在交换项中暂时不对自旋波函数求平均，则交换能在自旋波函数空间变成一个算符，即

$$
\hat{V}_{\text{ex}} = -J_{12}\hat{p}_\sigma, \quad J_{12} = \int \varphi_1^*(1)\varphi_2(2)\frac{\varepsilon\cdot e^2}{r_{12}}\varphi_1(2)\varphi_2(1)\mathrm{d}\vec{r}_1\mathrm{d}\vec{r}_2 \tag{4-66}
$$

下面证明交换项中的自旋交换算可表为

$$
\hat{P}_\sigma = \frac{1}{2}(\vec{\sigma}_1.\vec{\sigma}_2 + 1) = \frac{1}{2}(4\vec{S}_1.\vec{S}_2 + 1) \tag{4-67}
$$

考虑自旋 $\vec{S}^2 = (\vec{S}_1 + \vec{S}_2)^2$ 和 $\hat{S}_z$ 的本征态 $\chi_\mu^{2s+1}$：

对自旋三态当 $S = 1$ 时，

$$
\begin{aligned}
&\vec{S}^2\chi_\mu^3 = S(S+1)\chi_\mu^3 = 2\chi_\mu^3 \\
&\vec{S}_z\chi_\mu^3 = \mu\chi_\mu^3
\end{aligned} \tag{4-68}
$$

对自旋单态当 $S = 0$ 时，

$$
\begin{aligned}
&\vec{S}^2\chi_0^1 = 0(0+1)\chi_0^1 = 0\chi_0^1 \\
&\vec{S}_z\chi_0^1 = 0\chi_0^1
\end{aligned} \tag{4-69}
$$

其中, 对 $S = 1$, 有

$$
\begin{aligned}
&\chi_{+1}^3 = \chi_{1/2}(1)\chi_{1/2}(2) \\
&\chi_0^3 = \frac{1}{\sqrt{2}}[\chi_{1/2}(1)\chi_{-1/2}(2) + \chi_{1/2}(2)\chi_{-1/2}(1)] \\
&\chi_{-1}^3 = \chi_{-1/2}(1)\chi_{-1/2}(2)
\end{aligned} \tag{4-70}
$$

对 $S = 0$, 有

$$
\chi_0^1 = \frac{1}{\sqrt{2}}[\chi_{1/2}(1)\chi_{-1/2}(2) - \chi_{1/2}(2)\chi_{-1/2}(1)] \tag{4-71}
$$

$$
\chi_{1/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_{-1/2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{4-72}
$$

$\chi_{\pm 1/2}$ 是一个电子的自旋 $S_z$ 的本征函数，本征值为 $\pm\dfrac{1}{2}$。

显然自旋 3-态对电子自旋交换是对称的：

$$
P_\sigma\chi_\mu^3 = \chi_\mu^3 \tag{4-73a}
$$

而自旋单态是反对称的：

$$P_\sigma \chi_0^1 = -\chi_0^1 \tag{4-73b}$$

另外，

$$\vec{S}^2 = (\vec{S}_1 + \vec{S}_2)^2 = \vec{S}_1^2 + \vec{S}_2^2 + 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = \frac{3}{2} + \frac{1}{2}\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 = \frac{1}{2}(3 + \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) \tag{4-74}$$

由式 (4-74) 知, $\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2$ 可用 $\hat{S}^2$ 表示：

$$\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 = 2\vec{S}^2 - 3 \tag{4-75}$$

对三态 $\chi_\mu^3$，$S = 1$, 有

$$\begin{aligned} &\vec{S}^2 = 1(1+1) = 2 \to \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 = 1 \\ &\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 \chi_\mu^3 = +1\chi_\mu^3 \\ &\hat{P}_\sigma \chi_\mu^3 = \frac{1}{2}(\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 + 1)\chi_\mu^3 = +1\chi_\mu^3 \end{aligned} \tag{4-76}$$

对单态 $\chi_0^1$，$S = 0$，$S^2 = 0, \to \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 = -3$, 有

$$\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 \chi_0^1 = -3\chi_0^1 \tag{4-77}$$

$$\hat{P}_0 \chi_0^1(12) = \frac{1}{2}(\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 + 1)\chi_0^1 = -1\chi_0^1$$

上述计算表明, 对 $\chi_\mu^3(12)$ 和 $\chi_0^1(12)$ 都有

$$\hat{P}_\sigma(12) = \frac{1}{2}(\vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_2 + 1) \tag{4-78}$$

因 $\chi_\mu^3$ 和 $\chi_0^1$ 构成两电子系统自旋波函数的完全集, 所以，对一般 $\chi(12)$, 也有

$$\hat{P}_\sigma = \frac{1}{2}(\vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2 + 1)$$

这样一来, 交换势能算符 $\hat{V}_{\mathrm{ex}}$ 化为

$$\hat{V}_{\mathrm{ex}} = -\frac{J_{12}}{2}(\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 + 1) = -\frac{J_{12}}{2}(4\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 + 1) \tag{4-79a}$$

略去常数项后

$$\hat{V}_{\mathrm{ex}} = -2J_{12}\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \tag{4-79b}$$

考虑晶体所有邻近电子之间的 Coulomb 交换项后，有 ($J_0 = 2J_{12}$)

$$\hat{H} = -J_0 \sum_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = -J_0 \sum_{i\delta} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+\delta} \tag{4-80}$$

这就是著名的 Heisenberg 模型 [5-7]，是在平均场近似的基础上考虑近邻电子之间的 Coulomb 相互作用势能的交换项产生的，是描述固体磁性的简化模型。

### 4.4.2　电子窄带关联与 Hubbard 模型：金属—绝缘相变

固体能带论对过渡区金属化合物的电性解释失败，与它略去电子–电子之间的剩余 Coulomb 相互作用引起的关联有关 [8,9]。考虑电子–电子之间的 Coulomb 相互作用后，周期场中电子系统的 Hamilton 量为

$$\hat{H} = \sum_i h(i) + \frac{1}{2}\sum_{ij} V(ij), \quad V(ij) = \frac{xe^2}{|r_i - r_j|} \tag{4-81}$$

取能带论单电子 Hamilton 量 $\hat{h}$ 的本征态表象：

$$\hat{h}\psi_{k\sigma} = E_k\psi_{k\sigma}, \quad \psi_{k\sigma} = \psi_k\chi_\sigma \tag{4-82}$$

相应的二次量子化表象为 $(\psi_{k\sigma} \to C^+_{k\sigma}, C_{k\sigma})$

$$\hat{H} = \sum_{k\sigma} E_k C^+_{k\sigma}C_{k\sigma} + \frac{1}{2}\sum_{k_1k_2k'_1k'_2\sigma\sigma'} \langle k_1k_2|v|k'_1k'_2\rangle C^+_{k_1\sigma}C^+_{k_2\sigma'}C_{k'_2\sigma'}C_{k'_1\sigma}$$

$$\langle k_1k_2|v|k'_1k'_2\rangle = \int \mathrm{d}\vec{r}_1\mathrm{d}\vec{r}_2\psi^*_{k_1}(\vec{r}_1)\psi^*_{k_2}(\vec{r}_2)v(12)\psi_{k'_2}(\vec{r}_2)\psi_{k'_1}(\vec{r}_1) \tag{4-83}$$

在 Wannier 表象中：

$$\psi_k(\vec{r}) = N^{-1/2}\sum_i \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{R}_i}a(\vec{r} - \vec{R}_i) \tag{4-84}$$

Wannier 表象波函数 $a(\vec{r} - \vec{R}_i)$ 是以点阵 $\vec{R}_i$ 为中心的电子的定域性波函数。离散的逆 Fourier 变换为

$$a(\vec{r} - \vec{R}_i) = N^{-1/2}\sum_k \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{R}_i}\psi_k(\vec{r}) \tag{4-85}$$

$N$ 为点阵数。相应的二次量子化表象也作一 Fourier 变换：

$$\begin{aligned} C^+_{i\sigma} &= N^{-1/2}\sum_k \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{R}_i}C^+_{k\sigma} \\ C_{i\sigma} &= N^{-1/2}\sum_k \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{R}_i}C_{k\sigma} \end{aligned} \tag{4-86}$$

在 Wannier 表象中：

$$\hat{H} = \sum_{ij\sigma} T_{ij}C^+_{i\sigma}C_{j\sigma} + \frac{1}{2}\sum_{ijkl\sigma\sigma'}\langle ij|v|kl\rangle C^+_{i\sigma}C^+_{j\sigma'}C_{l\sigma'}C_{k\sigma} \tag{4-87a}$$

$$T_{ij} = N^{-1/2}\sum_k \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot(\vec{R}_i - \vec{R}_j)}E_k \tag{4-87b}$$

$$\langle ij|v|kl\rangle = \int \mathrm{d}\vec{r}\mathrm{d}\vec{r}'a^*(\vec{r} - \vec{R}_i)a^*(\vec{r}' - \vec{R}_j)v(\vec{r} - \vec{r}')a(\vec{r}' - \vec{R}_l)a(\vec{r} - \vec{R}_k) \tag{4-87c}$$

用 Wannier 波函数计算的相互作用矩阵元为四中心 ($\vec{R}_i\vec{R}_j\vec{R}_k\vec{R}_l$) 积分。由于 Wannier 波函数定域在离子周围，不同离子的 Wannier 波函数之间重叠很小，相互作用矩阵元中只有单中心积分即同一原子 (离子) 中的两个电子的相互作用矩阵元最为重要。略去其余的多中心积分矩阵元后, 则有

$$\langle ij|v|kl\rangle \approx \delta_{ij}\delta_{kl}\delta_{ik}\langle ii|v|ii\rangle = \delta_{ij}\delta_{kl}\delta_{ik}U \quad (\text{由于晶体离散平移不变性，}U\text{与}i\text{无关})$$

$$\hat{H} = \sum_{ij\sigma} T_{ij}C_{i\sigma}^{+}C_{j\sigma} + \frac{U}{2}\sum_{i\sigma}\hat{n}_{i\sigma}\hat{n}_{i\bar{\sigma}} \quad (\bar{\sigma} = -\sigma) \tag{4-88}$$

$$\hat{n}_{i\sigma} = C_{i\sigma}^{+}C_{i\sigma} \tag{4-89}$$

由于 Pauli 原理，两个处于 $i$ 点阵的电子，自旋必相反。这就是著名的 Hubbard 模型。除能带论 (平均场理论) 描述的巡游电子项 (第一项) 外，它还考虑了两个电子处于同一点阵原子时的 Coulomb 排斥能。这一项对金属-绝缘相变起关键作用。当它很大时, 会阻碍电子在固体中的传播，金属就变成绝缘体。求解 Hubbard 模型是凝聚态物理的主要课题之一。近年来的研究表明，Hubbard 模型有可能用于描述高温超导，因此, 求解 Hubbard 模型更成为凝聚态物理的热点课题。

### 4.4.3 杂质磁性与 Anderson 模型

设金属中存在一个杂质原子 [10]，其中电子处于 d-态时能级为 $E_{d\sigma}$，巡游电子的能级为 $E_{k\sigma}$，当杂质原子 d-态填充两个电子时，存在 Coulomb 相互作用 (第三项)，其 Hamilton 量为

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \sum_{k\sigma} E_k\hat{n}_{k\sigma} + \sum_{\sigma} E_{d\sigma}\hat{n}_{d\sigma} + \frac{U}{2}\sum_{\sigma}\hat{n}_{d\sigma}\hat{n}_{d\bar{\sigma}} + \sum_{k\sigma} V_{kd}(C_{k\sigma}^{+}d_{\sigma} + d_{\sigma}^{+}C_{k\sigma})\\ \hat{n}_{k\sigma} &= C_{k\sigma}^{+}C_{k\sigma}, \quad \hat{n}_{d\sigma} = d_{\sigma}^{+}d_{\sigma}\end{aligned} \tag{4-90}$$

式 (4-90) 最后一项表示杂质中的 d-态电子与巡游电子可以相互转化，$U$ 与 $V_{\mathrm{kd}}$ 的竞争决定了杂质中电子的填充情况，因而决定了杂质的磁性 ($n_{d\sigma} = n_{d\bar{\sigma}}$ 时，磁性为零)，巡游电子与杂质相互作用会出现共振现象 (Kondo 共振)，是近年研究的热点。当金属中杂质原子较多但分布稀疏时，则可以先对一个杂质原子的情况求解，然后对稀疏分布的众多杂质原子做统计平均。

### 4.4.4 金属的超导电性与 Bardeen-Cooper-Schrieffer 模型

电子–声子相互作用 (电子与点阵离子振动的相互作用)：点阵离子的振动会影响电子运动，这是能带论略去的；这种相互作用可以诱导出一对电子之间的吸引力，形成所谓的 Cooper 对 (一对动量和自旋相反的电子，由于上述吸引力而结合成一个稳定的电子对)。Cooper 对的形成导致电子能谱出现能隙，是产生超导电性的原因 [11−13]。

为了描述这一现象，Bardeen-Cooper-Schrieffer 在等效的电子–电子剩余相互作用中，突出了形成 Cooper 对的相互作用 (称对力)，而略去其他相互作用，提出一个超导模型 (BCS 模型)，其 Hamilton 量为

$$\hat{H} = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k \hat{n}_{k\sigma} - G \sum_{kk'} a^+_{k'\uparrow} a^+_{-k'\downarrow} a_{-k\downarrow} a_{k\uparrow} \tag{4-91a}$$

$$\hat{n}_{k\sigma} = a^+_{k\sigma} a_{k\sigma} \tag{4-91b}$$

Cooper 对力是二体相互作用，要破坏电子的独立粒子运动，使电子运动状态不确定。但是, 如果作下述保持反对易关系不变的幺正变换, 把粒子的产生、消灭算符 $\{a_{k\sigma}, a^+_{k\sigma}\}$ 变为准粒子的产生、消灭算符 $\{\alpha_{k\sigma}, \alpha^+_{k\sigma}\}$：

$$\begin{aligned} \alpha^+_{k\sigma} &= U_k a^+_{k\sigma} - V_k a_{-k\bar{\sigma}} \\ \alpha_{k\sigma} &= U_k a_{k\bar{\sigma}} - V_k a^+_{-k\sigma} \end{aligned} \tag{4-92}$$

其逆变换为

$$\begin{aligned} a^+_{k\sigma} &= U_k \alpha^+_{k\sigma} + V_k \alpha_{-k\bar{\sigma}} \\ a_{k\sigma} &= U_k \alpha_{k\bar{\sigma}} + V_k \alpha^+_{-k\sigma} \end{aligned} \tag{4-93}$$

$$U_k^2 + V_k^2 = 1 \tag{4-94}$$

可证明，准粒子产生、消灭符仍然满足费米子对易关系：

$$\{a_{k\sigma}, a^+_{k'\sigma'}\} = \delta_{kk'}\delta_{\sigma\sigma'} \rightarrow \{\alpha_{k\sigma}, \alpha^+_{k'\sigma'}\} = \delta_{kk'}\delta_{\sigma\sigma'} \tag{4-95}$$

在准粒子表象中, 电子填充的几率为 $V_k^2$. 如果准粒子数 $\sum\limits_{k\sigma} \alpha^+_{k\sigma}\alpha_{k\sigma}$ 守恒，则粒子数 $\hat{N} = \sum\limits_{k\sigma} a^+_{k\sigma} a_{k\sigma}$ 就不守恒。因此，在准粒子表象，电子数不守恒。为解决这一问题，可以要求电子数 $N$ 的平均值守恒。因此，可以用 Lagrange 乘子方法，构造一个 $\hat{H}_\lambda$, 把粒子数平均守恒的约束条件纳入进去：

$$\hat{H}_\lambda = \hat{H} - \lambda \hat{N} \tag{4-96}$$

求解 $\hat{H}_\lambda$ 的基态解 $\Psi$，要求

$$\langle \Psi | \hat{N} | \Psi \rangle = N \tag{4-97}$$

可定出 $\lambda$(Fermi 能)。把 $\hat{H}_\lambda$ 在 $[\alpha_{k\sigma}, \alpha^+_{k\sigma}]$ 表象中表示出来，其中包含

| | |
|---|---|
| 常数项 | $E_0(\lambda)$ |
| 正比于$(\alpha^+_{k\sigma}\alpha_{k\sigma})$的项 | $\hat{H}_{11}$ |
| 正比于$(\alpha_{k\sigma}\alpha_{-k\bar{\sigma}} + \alpha^+_{k\sigma}\alpha^+_{-k\bar{\sigma}})$的项 | $\hat{H}_{20}$ |
| 正比于$\alpha^+_{k\sigma}\alpha^+_{-k\bar{\sigma}}\alpha_{-k'\bar{\sigma}'}\alpha_{k'\sigma'}$的项 | $\hat{H}_{22}$ |

$$\hat{H}_\lambda = E_0(\lambda) + \hat{H}_{11} + \hat{H}_{20} + \hat{H}_{22} \tag{4-98}$$

略去准粒子相互作用项 $\hat{H}_{22}$，让 $\hat{H}_{20}$ 的系数为 0(相当于在准粒子表象中把略去准粒子相互作用项的 Hamilton 量对角化，因此导致准粒子的平均场方程)，得 $(U_k, V_k)$ 满足的方程，其解使 $\hat{H}_\lambda$ 对角化，即

$$\hat{H}_\lambda = E_o(\lambda) + \sum_{k\sigma} E_k \alpha^+_{k\sigma}\alpha_{k\sigma} \tag{4-99}$$

其中，准粒子能量

$$E_k = \sqrt{(\varepsilon_k - \lambda)^2 + \mathit{\Delta}^2} \tag{4-100}$$

能隙

$$\mathit{\Delta} = G\sum_k U_k V_k \tag{4-101}$$

和幺正变换系数

$$\begin{aligned} U_k^2 &= \frac{1}{2}\left[1 + \frac{\varepsilon_k - \lambda}{E_k}\right] \\ V_k^2 &= \frac{1}{2}\left[1 - \frac{\varepsilon_k - \lambda}{E_k}\right] \end{aligned} \tag{4-102}$$

这是一组关于 $\mathit{\Delta}$ 的自洽场方程，可自洽定出 $U_k, V_k, E_k, \mathit{\Delta}$。在超导基态解中, 电子对能级的填充几率如图 4-1 所示。

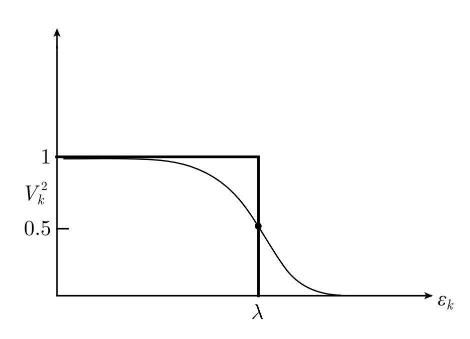



图 4-1 电子对能级的填充几率

以上是温度 $T = 0$ 的解。当 $T > 0$ 时，要运用包含温度的平均场理论，这时求出的能隙与温度有关：$\mathit{\Delta} = \mathit{\Delta}(T)$。从 $\mathit{\Delta}(T)$=0 可以定出超导的临界温度 $T_{\rm C}$。

在低温下，当 $T < T_{\rm c}$ 时，由于能隙 $\mathit{\Delta}$ 存在，准粒子不易被激发，电子的集体流动不会引起内部激发而损失能量，故出现超导 (超流) 现象。但当温度升高，$T > T_{\rm c}$ 时, 能隙消失 ($\mathit{\Delta} \to 0$), 准粒子很容易被集体流动激发, 电子的集体流动能量转化为内部热运动能, 电子流动出现电阻, 超导现象消失。

# 参 考 文 献

[1] 波戈留玻夫 N N. 量子统计学. 杨棨译. 北京：科学出版社, 1959.

[2] Fetter L A, Walecka G D. Quantum Theory of Many-Particle System. New York：McGraw-Hill, 1971.

[3] 徐躬耦，杨亚天. 原子核理论 (核结构与核衰变部分). 北京：高等教育出版社，1987.

[4] 李正中. 固体理论. 2 版. 北京：高等教育出版社, 2002.

[5] Hewson A C. The Kodon Problem to Heavy Fermions. Cambrodge：Cambridge University Press, 1993.

[6] Heisenberg W.Z. Phys, 1928, 49：619.

[7] Dirac P A M. Proc Roy Soc,1929, A123：714.

[8] Hubbard J. Proc Roy Soc,1963, A276：238.

[9] Hubbard J. Proc Roy Soc,1964, A281：401.

[10] Anderson P W. Phys Rev,1961, 124：41.

[11] Bardeen J, Cooper I N, Schrieffer J R. Phys Rev,1957, 103：1175.

[12] Schrieffer J R. Theory of Superconductivity. New York：Benjamin, 1964.

[13] Mahan G D. Many-Particle Physics. 2nd ed. New York：Plunum Press, 1990.

# 第 5 章　量子多体理论 (Ⅲ)-超越平均场近似的非微扰理论：密度矩阵理论和 Green 函数理论

## 5.1　纯态与混合态、多体系统的关联等级描述

第 3、4 章介绍的以平均场近似为中心的量子多体理论，都是基于多体系统的状态用一个波函数来描述，而这个波函数服从 Schroedinger 方程。这种以波函数和 Schroedinger 方程为基础的、对多体系统的描述是量子力学的描述。本章要介绍超越量子力学描述的量子统计力学的描述[1-3]。

### 5.1.1　纯态与混合态

从量子统计力学的观点看，用一个波函数描述的系统的状态称为纯态，这样的系统称为纯粹系综。在一般情况下，由于环境的影响, 一个量子系统需要用几个或一系列波函数 $\psi_1, \psi_2, \cdots, \psi_n, \cdots$ 来描述，每一个状态以一定的几率 $w_1, w_2, \cdots, w_n, \cdots$ 出现，但这一系列波函数却不能叠加产生一个新的量子态而只是一系列状态的混合。这样的量子状态称为混合态，这样的系统称为混合系综。例如，把一个量子系统放在一个热槽中，由于受热槽的影响，这个系统的本征态 $\{E_n, \psi_n\}$ 会以 $w_n \approx \mathrm{e}^{-E_n/kT}$ 的几率出现，这些几率 $w_n$ 不是由量子力学定律决定的几率，而是由统计热力学定律 (所谓正则系综) 决定的几率，对量子力学而言, 是经典性的几率。

对于混合系综，第 3、4 章描述纯粹系综的量子力学方法显然是不够的，必须寻求新的描述方法。本章介绍的密度矩阵理论和 Green 函数理论正好适合对混合系综的描述。因为纯粹系综是混合系综的特例 ($w_k = 1$，其他 $w_n = 0, n \neq k$)，密度矩阵描述和 Green 函数描述自然也适合描述纯粹系综，所以与使用波函数的量子力学描述是等价的。

### 5.1.2　多体系统的关联等级理论

除了适应描述混合系综即量子统计力学的需要外，发展密度矩阵理论和 Green 函数理论还有别的原因。其中之一是这两种理论都蕴含着按粒子数从少到多的关联等级描述的可能性。前面已指出，剩余相互作用要破坏粒子的独立量子运动，造成粒子间的关联。这种关联按粒子数多少有二体关联、三体关联直至 $n$-体关联等不同等级的多体关联。密度矩阵理论和 Green 函数理论能很好地描述粒子之间因

相互作用、相互影响而形成的多体关联，而且能发展成为描述各个不同等级的多体关联的关联等级理论，在适当的等级截断下，它成为不仅包含平均场，而且还包含各种高阶关联的非微扰理论。这正是处理强耦合系统所特别需要的，因而具有特殊的吸引力[3]。

## 5.2 密度矩阵理论：多体关联密度矩阵动力学

### 5.2.1 密度矩阵与 von Neumann 方程

考虑具有二体相互作用的费米子系统，其 Hamilton 量为

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{A} \hat{h}(i) + \frac{1}{2}\sum_{i \neq j}^{A} v(ij), \quad \hat{H}^{+} = \hat{H} \tag{5-1}$$

$$\hat{h} = \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(r) \tag{5-2}$$

而与时间有关的多体 Schroedinger 方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi_A(x)}{\partial t} = \hat{H}\psi_A(x) \tag{5-3a}$$

其共轭方程为

$$-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi_A(x')^*}{\partial t} = \hat{H}(x')\psi_A(x')^* \tag{5-3b}$$

由 $\psi_A(x)^* \times$ 式(5-3a) $-$ 式(5-3b) $\times \psi_A(x')$ 得

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\rho_A(x,x')}{\partial t} = \hat{H}(x)\rho_A(x,x') - \rho_A(x,x')\hat{H}(x') \tag{5-4}$$

式 (5-4) 称为 von Neumann 方程，是 $A$ 个粒子的量子系统的密度矩阵

$$\rho_A(x,x',t) = \psi_A(xt)\psi_A^*(x't) \tag{5-5}$$

所满足的运动方程[2,3]。$\rho_A(x,x',t)$ 是密度矩阵算符 (统计算符)$\hat{\rho}_A$ 在坐标表象的矩阵元, 其中 $(x,x')$ 是矩阵的行列指标, 与通常的力学量矩阵的行列指标为离散量子数不同, 它们取坐标的连续值, 即坐标成为量子数标号。写成算符形式后，von Neumann 方程可简写为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\hat{\rho}_A}{\partial t} = \left[\hat{H}\hat{\rho}_A - \hat{\rho}_A\hat{H}\right] = \hat{L}_H\hat{\rho}_A \tag{5-6}$$

$\hat{L}_H$ 是对应于 Hamilton 量 $\hat{H}$ 的 von Neumann 算符 (或量子 Liouville 算符)，$\hat{\rho}_A$ 可用 Dirac 符号抽象地表示为

$$\hat{\rho}_A = |\psi_A\rangle\langle\psi_A| \tag{5-7}$$

$\hat{\rho}_A$ 在 X–表象中的矩阵元为

$$\rho_A(x,x',t)=\langle x|\hat{\rho}_A|x'\rangle=\langle x|\psi_A\rangle\langle\psi_A|x'\rangle=\psi_A(x)\psi_A^*(x') \tag{5-8}$$

可以证明, von Neumann 方程 (5-6) 与 Schroedinger 方程 (5-3) 等价。以 $\psi_A(x')$ 右乘式 (5-6) 并对 $\mathrm{d}x'$ 积分得 (用到归一化条件不变的常数, $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi_A|\psi_A\rangle=0$)

$$\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}-\hat{H}\right)\psi_A(x,t)=\left[\langle\psi_A|\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi_A\rangle-\langle\psi_A|H|\psi_A\rangle\right]\psi_A(x,t)$$

由于 $\psi_A(x,t)$ 的任意性，算子 $\left(\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}-\hat{H}\right)$ 作用在任意的 $\psi_A(x,t)$ 上还等于 $\psi_A(x,t)$ 是不可能的，所以，必有 $\left(\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}-\hat{H}\right)\psi(x,t)=0$，方程才能成立。这就从 von Neumann 方程得到 Schroedinger 方程。

von Neumann 方程可以推广到混合系综的情况。设 $|\psi_n\rangle$ 是 $\hat{H}$ 的本征态, 这时，

$$\hat{\rho}_A=\sum_n w_n|\psi_n\rangle\langle\psi_n|,\quad \sum_n w_n=1,\dot{w}_n=0 \tag{5-9}$$

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\hat{\rho}_A}{\partial t}=(\hat{H}\hat{\rho}_A-\hat{\rho}_A\hat{H})=\hat{L}_H\hat{\rho}_A \tag{5-10}$$

其中，

$$\hat{H}|\psi_n\rangle=E_n|\psi_n\rangle,\quad \langle\psi_n|\psi_m\rangle=\delta_{nm} \tag{5-11}$$

反之, 假定未知的对角化的 $\rho_A$ 满足 von Neumann 方程, 把式 (5-9) 代入式 (5-10) 得

$$\sum_n w_n\left\{\left[\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}-\hat{H}\right)|\psi_n\rangle\right]\langle\psi_n|-|\psi_n\rangle\left[\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle\psi_n|\right)-(\langle\psi_n|\hat{H})\right]\right\}=0$$

由于 $|\psi_n\rangle$ 和 $\langle\psi_n|$ 的独立性和 $w_n$ 的任意性, 上面等式成立的唯一可能性是

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi_n\rangle=\hat{H}|\psi_n\rangle\quad 和\quad -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle\psi_n|=\langle\psi_n|\hat{H}$$

即 $|\psi_n\rangle$ 满足 Schroedinger 方程。所以, 混合系综的 von Neumann 方程与纯粹系综的 von Neumann 方程是自洽的, 都与 Schroedinger 方程等价。

混合态的分布几率 $w_n$ 是外部引进的、与时间无关的，因此, von Neumann 方程描述的混合系综的动力学演化, 实质上是由所有波函数 $\psi_n(x,t)$ 的量子力学演化引起的 $\hat{\rho}_A(t)$ 的动力学演化。在 $\hat{\rho}_A$ 中 $\psi_n(x,t)$ 是量子力学波函数，而 $w_n$ 是外来的经典统计量。

### 5.2.2　约化密度矩阵与多体关联密度矩阵动力学

1. 约化密度矩阵及其运动方程

引进 $n$-体约化密度矩阵

$$\rho_n(12\cdots n;1'2'\cdots n') = \frac{1}{(A-n)!}\underset{(n+1\cdots A)}{\mathrm{Tr}}\rho_A(12\cdots nn+1\cdots A;1'2'\cdots n'n+1\cdots A)$$
$$= \frac{1}{(A-n)!}\int \mathrm{d}x_{n+1}\cdots \mathrm{d}x_A\rho_A(x_1\cdots x_n x_{n+1}\cdots x_A;x_1'\cdots x_n' x_{n+1}\cdots x_A) \tag{5-12}$$

其中 $x_i=(\vec{r}_i,s_{iz},\tau_{i3})$，Tr 为求迹运算, 即对粒子的连续坐标 $\vec{r}$ 积分、对离散坐标 $s_z,\tau_3$ 求和的运算。令单粒子一体密度矩阵 $\rho_1(x,x')=\rho(x,x')$, 其对角元素 $\rho(x,x)$ 表示多体系统在点 $x$ 的粒子密度; 二体密度矩阵 $\rho_2$ 的对角元 $\rho_2(x_1x_2;x_1x_2)$ 表示在点 $x_1$ 和点 $x_2$ 存在粒子的联合密度，其余以此类推。从式 (5-9) 可见, $\hat{\rho}_n$ 的对角元出现的量子力学波函数的相位角正好与其复共轭波函数的相位角抵消, 只有 $\hat{\rho}_n$ 的非对角元体现出多粒子系统的量子力学波函数的全部信息即相位和振幅，包含着物质波的相干性的信息。因此，量子力学波函数作为物质波的动力学信息主要包含在 $\hat{\rho}_n$ 的非对角元之中，它们真正体现出量子力学相干与关联。

对 $\rho_A$ 的运动方程求迹，可以得到 $\rho_n$ 的运动方程, 即

一体密度矩阵的运动方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\rho(11')}{\partial t} = [\hat{h}(1)\rho(11')-\rho(11')\hat{h}(1')] + \underset{(2)}{\mathrm{Tr}}[v(12)\rho_2(12,1'2')-\rho_2(12,1'2')v(1'2')]$$
$$= [\hat{h},\rho] + \underset{(2)}{\mathrm{Tr}}[v,\rho_2] \tag{5-13}$$

二体密度矩阵的运动方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\rho_2}{\partial t} = [\hat{h}(1)+\hat{h}(2),\rho_2] + \underset{(3)}{\mathrm{Tr}}[v(13)+v(23),\rho_3] \tag{5-14}$$

$n$-体密度矩阵的运动方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\rho_n}{\partial t} = \cdots \tag{5-15}$$

上述 $\rho_n$ 的运动方程叫 BBGKY 系列，是链条式的耦合的线性的运动方程组系列，与 von Neumann 方程等价。BBGKY 系列的优点是把描述多体系统的总体性质 $\rho_A$ 的运动方程，分解成描述 $\rho_1,\rho_2,\rho_3,\cdots,\rho_n$ 等一系列部分粒子集团的性质的运动方程，$\rho_n$ 所描述的 $n$ 个粒子集团子结构正好包含量子多体系统的 $n$- 体关联。BBGKY 系列的缺点是它没有提供一个合理而系统的截断方案，因而这个众多 (几乎无限) 的运动方程组系列不能截断求解。克服这一缺点的努力导致关联密度矩阵动力学的建立[3−5]。

2. 多体关联密度矩阵动力学

对约化密度矩阵 $\rho_n$ 作集团展开

$$\rho_n = AS\sum_{p=1}^{n-1}\rho_{n-p}\rho_p + C_n(c_1 = \rho_1 = \rho) \tag{5-16}$$

式中，$C_n$ 是 $n$-体关联, $A$ 是反对称化运算, $S$ 是对称化运算。以 $\rho_2$ 为例, 有

$$\begin{aligned}\rho_2(12,1'2') &= AS\rho(11')\rho(22') + C_2(12,1'2')\\ &= \rho(11')\rho(22') - \rho(12')\rho(21') + C_2(12,1'2')\end{aligned} \tag{5-17}$$

通过集团展开, $\rho_n$ 的运动方程就变成 $C_n$ 的运动方程 $(c_1 = \rho)$

$$\mathrm{i}\hbar\dot{\rho} = [h,\rho] + \mathrm{Tr}[v, AS\rho\rho + C_2] \tag{5-18}$$

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar\dot{C}_2 &= [h(1)+h(2), C_2] + [v, AS\rho\rho + C_2]\\ &\quad + \mathrm{Tr}[v(13)+v(23), AS(\rho\rho\rho + \rho C_2 + C_3]_L\end{aligned} \tag{5-19}$$

$$\mathrm{i}\hbar\dot{C}_n = \cdots \tag{5-20}$$

其中 $[\cdots]_L$ 表示连接项，该项中每个函数因子中的变量是重复相连的，对应于场论中连接的 Feynman 图形。

方程 (5-18)∼ 方程 (5-19) 构成了关联密度矩阵动力学的基本方程 [3−5]，其特点是：

(1) 从 $\rho_n$ 中分离出连接的不可约部分，像场论中的不可约连接图形，避免了信息的重复；

(2) 是非线性的耦合的运动方程, 既体现各阶多体关联的相对独立性, 又体现出它们之间的耦合与关联；

(3) 因为多体关联 $C_n$ 随 $n$ 的增加而迅速减小，方程组本身提供了一个自然而合理的截断方案；

(4) 对每一种截断近似，都导致一组封闭的非线性非微扰的耦合的运动方程。

3. 二体关联密度矩阵动力学及其应用

二体关联密度矩阵动力学方程组由假定三体以上的关联为零而得到

$$\mathrm{i}\hbar\dot{\rho} = [h,\rho] + \mathrm{Tr}[v(12), AS\rho\rho + C_2] \tag{5-21a}$$

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar\dot{C}_2 &= [h(1)+h(2), C_2] + [v(12), AS\rho\rho + C_2]\\ &\quad + \mathrm{Tr}[v(13)+v(23), AS(\rho\rho\rho + \rho C_2)]_L\end{aligned} \tag{5-21b}$$

这是耦合的、非线性的、非微扰的、包含一体密度矩阵 $\rho$ 和二体关联矩阵 $C_2$ 的封闭的运动方程组，是超越平均场近似 (TDHF) 的运动方程，已获得广泛的应用。

1) 平均场近似：TDHF 和 HF

令 $C_2$=0，从二体关联密度矩阵动力学方程得到平均场近似的方程

$$\mathrm{i}\hbar\dot{\rho} = [h, \rho] + \mathrm{Tr}[v(12), AS\rho\rho] \tag{5-22}$$

这是密度矩阵形式的 TDHF 理论。

因为 $\hat{\rho}$ 是 Hermite 的，可以通过幺正变换对角化，在其本征表象中

$$\hat{\rho} = \sum_{\alpha} n_{\alpha}|\psi_{\alpha}\rangle\langle\psi_{\alpha}| \tag{5-23}$$

填充状态 $|\psi_{\alpha}\rangle$ 的几率 $n_{\alpha}$ 满足

$$\sum_{\alpha} n_{\alpha} = A, \cdots, \quad 0 \leqslant n_{\alpha} \leqslant 1 \tag{5-24}$$

$|\psi_{\alpha}\rangle$ 是正交归一完备的单粒子态，

$$\langle\psi_{\alpha}|\psi_{\beta}\rangle = \delta_{\alpha\beta}, \cdots, \quad \sum_{\alpha}|\psi_{\alpha}\rangle\langle\psi_{\alpha}| = I \tag{5-25}$$

显然 $|\psi_{\alpha}\rangle$ 是 $\hat{\rho}$ 的本征态，其本征值为 $n_{\alpha}$

$$\hat{\rho}|\psi_{\alpha}\rangle = \sum_{\alpha'} n_{\alpha'}|\psi_{\alpha'}\rangle\langle\psi_{\alpha'}|\psi_{\alpha}\rangle = \sum_{\alpha'} n_{\alpha'}\delta_{\alpha\alpha'}|\psi_{\alpha'}\rangle = n_{\alpha}|\psi_{\alpha}\rangle \tag{5-26}$$

一般情况下，$0 \leqslant n_{\alpha} \leqslant 1$，因此

$$|\hat{\rho}^2| = \left|\sum_{\alpha} n_{\alpha}^2|\psi_{\alpha}\rangle\langle\psi_{x}|\right| \leqslant |\hat{\rho}| \tag{5-27}$$

TDHF 近似为独立粒子近似，每个粒子有确定的量子态，即填充几率必须为 $n_{\alpha} = 1$ 或 0。这样

$$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho} \rightarrow n_{\alpha} = \begin{cases} 1, & \text{填充,} \\ 0, & \text{不填充} \end{cases} \tag{5-28}$$

因此，TDHF 的 $\hat{\rho}_{\mathrm{TDHF}}$ 为

$$\hat{\rho}_{\mathrm{TDHF}} = \sum_{\alpha}|\psi_{\alpha}\rangle\langle\psi_{\alpha}| \tag{5-29}$$

把 $\hat{\rho}_{\mathrm{TDHF}}$ 代入 $\hat{\rho}$ 的运动方程，按照从 von Neumann 方程到 Schroedinger 方程类似的推导，可得

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi_{\alpha}}{\partial t} = (\hat{h} + \hat{U}_{\mathrm{TDHF}})\psi_{\alpha} \tag{5-30a}$$

其中，平均场 $\hat{U}_{\text{TDHF}}$ 与 $t$ 有关, 定义为

$$\hat{U}_{\text{TDHF}}\psi_\alpha(x) = \sum_\beta \int \psi_\beta^*(1')v(1'1)[\psi_\beta(1')\psi_\alpha(1) - \psi_\beta(1)\psi_\alpha(1')]\text{d}1' \tag{5-30b}$$

这正是 TDHF 方程。在定态极限下 $\psi_\alpha(xt) = \text{e}^{-\text{i}\varepsilon_\alpha t/\hbar}\psi_\alpha(x)$, 导致 HF 方程

$$(\hat{h} + \hat{U}_{\text{HF}})\psi_\alpha(x) = \varepsilon_\alpha\psi_\alpha(x) \tag{5-31}$$

其中，$U_{\text{HF}}(x)$ 与 $t$ 无关。方程 (5-31) 是单粒子在平均场中的本征方程 (第 3 章)。

2) 应用：原子的表面振动, 巨共振和重离子核反应

二体关联密度矩阵动力学方程在原子核的表面振动、巨共振、重离子碰撞的质量扩散和重离子核反应输运问题等方面获得了成功的应用。现在简单介绍这些方面的情况。

对于原子核的表面振动和巨共振，量子运动的振幅较小，因此可以选取 TDHF 的单粒子态解作为表象的基矢。设 TDHF 的解为 $\psi_\alpha(x,t)$，满足

$$\text{i}\hbar\frac{\partial\psi_\alpha}{\partial t} = (\hat{h} + \hat{U}_{\text{TDHF}})\psi_\alpha$$

原则上, 这样的解是正交完备归一的，$\langle\psi_\alpha|\psi_\beta\rangle = \delta_{\alpha\beta}$。
为了使二体关联能发展起来，要求基矢 $\psi_\alpha$ 的数目 $N$ 比核子的数目 $A$ 大很多，即 $N \gg A$。把 $\rho$ 和 $C_2$ 在 $\psi_\alpha$ 基矢上展开

$$\rho(x,x';t) = \sum_{\alpha\beta} n_{\alpha\beta}\psi_\alpha(x,t)\psi_\beta^*(x',t) \tag{5-32a}$$

$$C_2(x_1x_2,x_1'x_2';t) = \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} C_{\alpha\beta\gamma\delta}\psi_\alpha^*(x_1,t)\psi_\beta^*(x_2,t)\psi_\delta(x_2',t)\psi_\gamma(x_1',t) \tag{5-32b}$$

把式 (5-32) 代入 $\rho$ 和 $C_2$ 的运动方程 (5-21) 并运用基矢的 TDHF 方程，可以得到 $\rho$ 和 $C_2$ 的展开式系数 $n_{\alpha\beta}$ 和 $C_{\alpha\beta\gamma\delta}$ 的运动方程，它们与 TDHF 方程联立，组成了二体关联密度矩阵动力学中 $\rho$ 和 $C_2$ 的运动方程在 TDHF 方程的解 $\{\psi_\alpha\}$ 所张的子空间内的近似方程。子空间越大，越接近原来的运动方程。求解了 $\psi_\alpha$，$n_{\alpha\beta}$ 和 $C_{\alpha\beta\gamma\delta}$ 的运动方程之后，就可以构造出 $\rho$ 和 $C_2$，从而计算一元型力学量和二元型力学量的平均值，如

动量

$$\langle\hat{\vec{P}}\rangle = \text{Tr}\rho\hat{\vec{P}}$$

粒子数

$$\langle\hat{n}\rangle = \text{Tr}\hat{\rho}$$

能量

$$\langle\hat{H}\rangle=\mathrm{Tr}\rho\hat{h}+\frac{1}{2}\mathrm{Tr}(A\rho(1)\rho(2)+C_2)v(12) \tag{5-33}$$

求解二体关联动力学方程组所用的 TDHF 方程的解与通常的 TDHF 方程的解是不同的，通常的 TDHF 方程的解 $\{\psi_\alpha\}$ 的数目 $N$ 与系统的粒子数目 $A$ 是相等的 $N=A$；由这样的基矢构造的 $\rho$，其对角化后的本征值 $n_\alpha$ 只能取 0 或 1($n_\alpha$=0 或 1)。在这样的表象中可以证明 $C_2$ 不可能发展起来，而且 $C_2$=0。其证明如下所示。因

$$\rho_2(x_1x_2,x_1'x_2';t)=\rho(x_1x_1't)\rho(x_2x_2't)-\rho(x_1x_2')\rho(x_2x_1't)+C_2(x_1x_2,x_1'x_2't) \tag{5-34}$$

从

$$\rho(x_1x_1't)=\frac{1}{(A-1)}\mathop{\mathrm{Tr}}_{(x_2)}\rho_2(x_1x_2,x_1'x_2';t) \tag{5-35}$$

及 $\rho$ 和 $C_2$ 在 $\rho$ 的本征表象的展开式

$$\rho(x,x';t)=\sum_\alpha n_\alpha\psi_\alpha(x,t)\psi_\alpha^*(x',t) \tag{5-36}$$

$$C_2(x_1x_2,x_1'x_2';t)=\sum_{\alpha\beta\gamma\delta}C_{\alpha\beta\gamma\delta}\psi_\alpha^*(x_1,t)\psi_\beta^*(x_2,t)\psi_\delta(x_2',t)\psi_\gamma(x_1',t) \tag{5-37}$$

$$\langle\psi_\alpha|\psi_\beta\rangle=\delta_{\alpha\beta}$$

可得

$$n_\alpha^2-n_\alpha-C_\alpha=0,\quad C_\alpha=\sum_\beta C_{\alpha\beta\alpha\beta} \tag{5-38}$$

$$n_\alpha=(1\pm\sqrt{1+4C_\alpha})/2 \tag{5-39}$$

如果 $n_\alpha=0$ 或 1，必有 $C_\alpha=0$，因此，$C_2=0$。反之，若 $C_\alpha\neq0$，则单粒子填充数必偏离 0 和 1 ，即关联使费米子系统偏离矩形分布。上述分析表明，要使二体关联 $C_2$ 充分发展起来，基矢 $\psi_\alpha$ 的数目必须很大，使 $n_\alpha<1$，才有 $C_\alpha\neq0$。这就使计算量增加。实际计算要求计算时间与计算精度的平衡，选择适当大的单粒子态子空间。

重离子核反应属于大振幅运动，若仍用 TDHF 表象，则基矢 $\psi_\alpha$ 的数目必须非常大，才能较好描述大振幅运动，这在计算上是难于实现的，必须寻找另外的更合适的表象。研究表明，时间有关的高斯波包表象 (或时间有关的相干态表象)，对于描述重离子核反应这样的大振幅量子运动是方便的。把二体关联密度矩阵动力学方程在运动的高斯波包表象中求解，这就是重离子核反应的二体关联输运理论 (TBCTT)[6]。

### 5.2.3 两类不同自由度的约化密度矩阵

考虑一个量子体系有两类不同的自由度，人们关心的相关的自由度 $\{X_i\}$ 和人们不大关心的非相关的自由度 $\{\xi_j\}$。系统的 Hamilton 量为

$$\hat{H}(X,\xi) = \hat{H}_0(X) + \hat{H}_1(\xi) + \hat{H}_{\text{int}}(X,\xi) \tag{5-40}$$

从时间有关的 Schroedinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi(X,\xi,t)}{\partial t} = \hat{H}(X,\xi)\psi(X,\xi,t) \tag{5-41}$$

可得 von Neumann 方程

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\rho(X,\xi,X',\xi',t)}{\partial t} &= [\hat{H},\rho] \\ &= \hat{H}(X,\xi)\rho(X,\xi,X',\xi',t) - \rho(X,\xi,X',\xi',t)\hat{H}(X'\xi')\end{aligned} \tag{5-42}$$

若只对子系统 $\{X_i\}$ 感兴趣，则可以把$\{\xi_i\}$自由度积分掉，得 $\{X_i\}$ 空间的约化密度矩阵

$$\rho(X,X',t) = \operatorname*{Tr}_{(\xi)}\rho(X_i\xi_i,X_i'\xi_i,t) \tag{5-43}$$

及其运动方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\rho(X,X',t)}{\partial t} = \operatorname*{Tr}_{(\xi)}[\hat{H}(X\xi)\rho(X\xi,X'\xi',t) - \rho(X\xi,X'\xi t)\hat{H}(X'\xi')] \tag{5-44}$$

进而计算 $\{X_i\}$ 空间的力学量 $\hat{O}(X,\hat{P})$ 的平均值。反之，可得 $\{\xi_i\}$ 空间的约化密度矩阵，

$$\rho(\xi,\xi',t) = \operatorname*{Tr}_{(X)}\rho(X_i\xi_i,X_i'\xi_i,t) \tag{5-45}$$

及其运动方程，并计算相应的力学量 $\hat{O}(\xi,\hat{P}_\xi)$ 的平均值。

例如，一个谐振子在热槽的影响下运动，则振子自由度 $\{X_i\}$ 是我们关心的，热槽分子的自由度$\{\xi_i\}$是我们不大关心的，对$\{\xi_i\}$积分求迹相当于只考虑热槽分子对振子的总体平均影响而不考虑其细节。

下面介绍一个具体而重要例子, 从而得知如何获得约化密度矩阵的运动方程。考虑二能级原子与环境热辐射场相互作用的系统[9], 式 (5-40)Hamilton 量具体化为

$$H = \frac{1}{2}\hbar\omega_0\sigma_z + \sum_k \hbar\omega_k b_k^+ b_k + \left[\sum_k g_k b_k \sigma_+ + H,C\right] \tag{5-40a}$$

式 (5-40a) 第一项是二能级原子的 Hamilton 量, 第二项是环境热辐射场 (光子) 的 Hamilton 量, 第三项是二者的相互作用; 整个系统包括二能级原子中电子的自由度

(用 Pauli 矩阵 $\sigma_\nu(\nu=+,-,z)$ 表示) 和环境热辐射场光子的自由度 (用光子产生消灭算符 $b_k^+, b_k$ 表示)。在相互作用表象中考虑相互作用的二级微扰, 在 Markov 近似下, 得到式 (5-44) 具体化的原子的约化密度矩阵的运动方程

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\rho(t)}{\mathrm{d}t}=&-\frac{\mathrm{i}}{2}\omega_0[\sigma_z,\rho]-\frac{\gamma}{2}(\bar{n}_0+1)(\sigma_+\sigma_-\rho+\rho\sigma_+\sigma_--2\sigma_-\rho\sigma_+)\\&-\frac{\gamma}{2}\bar{n}_0(\sigma_-\sigma_+\rho+\rho\sigma_-\sigma_+-2\sigma_+\rho\sigma_-)\end{aligned}\tag{5-44a}$$

$$\bar{n}_0=1/(\mathrm{e}^{\hbar\omega_0/kT}-1),\quad \gamma=2\pi\sum_k|g_k|^2\delta(\omega_k-\omega_0)\tag{5-44b}$$

在量子通信与量子计算中, 二能级原子可以用做成一个量子比特, 环境辐射场与原子相互作用引起的耗散和退相干是必须考虑的问题。对于一个原子, 这一过程可以用式 (5-44a, b) 来描述。我们在第二篇第 14 章将介绍如何用代数动力学对式 (5-44a, b) 求解。

## 5.3 Green 函数理论：多体关联 Green 函数动力学

前面介绍的密度矩阵理论是单时理论，即 $\rho_n(t)$ 只含一个时间。它丢掉了多体系统的一些信息，主要是能量和信息传播中的因果推迟效应。对于非相对论量子系统，粒子运动的速度相对于光速很小，推迟效应并不重要。因此，密度矩阵理论适合处理非相对论量子系统。

如果要把单时密度矩阵理论中丢掉的信息找回来，就必须过渡到多时理论。密度矩阵理论的多时推广就是 Green 函数理论，它是非相对论量子力学过渡到相对论量子场论的桥梁。

先通过一个粒子系统的 Green 函数, 获得对 Green 函数的物理内涵和计算方法的清晰了解, 然后再转入多体系统 Green 函数理论介绍 [7,8]。

### 5.3.1 一个粒子系统的 Green 函数

考虑一个粒子的波动方程 (定态 Schroedinger 方程)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\hat{\vec{\nabla}}^2+U(\vec{r})\right]\varPsi(\vec{r})=E\varPsi(\vec{r})\tag{5-46a}$$

把式 (5-46a) 改写成适合用 Green 函数方法求解的形式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\hat{\vec{\nabla}}^2-E\right]\varPsi(\vec{r})=-U(\vec{r})\varPsi(\vec{r})=-Q(\vec{r})=-\int\delta(\vec{r}-\vec{r}')Q(\vec{r}')\mathrm{d}\vec{r}'\tag{5-46b}$$

式 (5-46b) 可以看成存在分布源 $Q(\vec{r})$ 时，一个能量为 $E$ 的粒子波在空间中从 $\vec{r}'$

向 $\vec{r}$ 的传播。其形式解为

$$\Psi(\vec{r}) = -\frac{1}{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 - E\right)}\int \delta(\vec{r}-\vec{r}\,')Q(\vec{r}\,')\mathrm{d}\vec{r}\,' = \int G(\vec{r}-\vec{r}\,')Q(\vec{r}\,')\mathrm{d}\vec{r}\,' \tag{5-47}$$

其中，$G(\vec{r}-\vec{r}\,')$ 是存在点源时波动方程的解, 满足

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\hat{\vec{\nabla}}^2 - E\right] G(\vec{r}-\vec{r}\,') = -\delta(\vec{r}-\vec{r}\,') \tag{5-48}$$

式 (5-48) 描述一个能量为 $E$ 的粒子波在空间中从 $\vec{r}\,'$ 向 $\vec{r}$ 处的传播，其形式解为

$$G(\vec{r}-\vec{r}\,') = -\frac{1}{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 - E\right)}\delta(\vec{r}-\vec{r}\,') \tag{5-49}$$

$G(\vec{r}-\vec{r}\,')$ 是描述这个传播过程的传播子，又称 Green 函数。

对于 Green 函数的谱分解。考虑 $\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\right)$ 的本征解

$$\begin{aligned} &\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\right)\psi_k(\vec{r}) = E_k\psi_k(\vec{r}) \\ &\psi_k(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}} \\ &E_k = \frac{\hbar^2k^2}{2m} \end{aligned} \tag{5-50}$$

$\psi_k$ 的完备性可表为

$$\delta(\vec{r}-\vec{r}\,') = \int \psi_k(\vec{r})\psi_k^*(\vec{r}\,')\mathrm{d}\vec{k} = \frac{1}{(2\pi)^3}\int \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')}\mathrm{d}\vec{k} \tag{5-51}$$

这正是定义 $\delta$-函数的公式。把式 (5-51) 代入 Green 函数的表达式 (5-49)，得到

$$\begin{aligned} G(\vec{r}-\vec{r}\,') &= \frac{-1}{(2\pi)^3}\int \mathrm{d}\vec{k}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}\frac{1}{E_k - E}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}\,'} \\ &= \frac{-1}{(2\pi)^3}\frac{2\pi}{\mathrm{i}|\vec{r}-\vec{r}\,'|}\int k\mathrm{d}k\frac{1}{E_k - E}[\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|\vec{r}-\vec{r}\,'|} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k|\vec{r}-\vec{r}\,'|}] \end{aligned}$$

设 $E = \frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}$，则可算出 $G(\vec{r}-\vec{r}\,')$。依赖边界条件,Green 函数有两个独立的解 (这也正是二阶偏微分方程所要求的), 可用留数定理求得

$$G(\vec{r}-\vec{r}\,') = \frac{-2m}{\hbar^2(2\pi)^2\mathrm{i}|\vec{r}-\vec{r}\,'|}\int k\mathrm{d}k\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|\vec{r}-\vec{r}\,'|} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k|\vec{r}-\vec{r}\,'|}}{(k+\kappa\pm\mathrm{i}\varepsilon)(k-\kappa\mp\mathrm{i}\varepsilon)}$$

$$
= \begin{cases} \dfrac{m}{2\pi\hbar^2}\dfrac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\kappa|\vec{r}-\vec{r}\,'|}}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|}, & k\to\kappa+\mathrm{i}\varepsilon \\ \dfrac{m}{2\pi\hbar^2}\dfrac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\kappa|\vec{r}-\vec{r}\,'|}}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|}, & k\to\kappa-\mathrm{i}\varepsilon \end{cases} \tag{5-52}
$$

第一个解是向外扩展传播的球面波, 第二个解是向内汇聚传播的球面波。如果只要求向外球面波，则须让 $k\to\kappa+\mathrm{i}\varepsilon$。因此，边界条件可以通过 $k$ 向复平面上的解析延拓来实现。

Green 函数是有点源的波动方程的传播子。对于非点源而有分布的源，波动方程可以用 Green 函数来求解。由式 (5-47) 和式 (5-49) 有

$$
\psi(\vec{r}) = \int G(\vec{r}-\vec{r}\,')Q(\vec{r}\,')\mathrm{d}\vec{r}\,'
$$

即有分布源的解是各点源的 Green 函数解的对源的分布的叠加。对粒子在势场 $U(\vec{r})$ 中的运动，则 $Q(\vec{r})=U(\vec{r})\psi(\vec{r})$，故有

$$
\psi(\vec{r}) = \int G(\vec{r}-\vec{r}\,')Q(\vec{r}\,')\mathrm{d}\vec{r}\,' = \frac{m}{2\pi\hbar^2}\int \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|\vec{r}-\vec{r}\,'|}}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|}U(\vec{r}\,')\psi(\vec{r}\,')\mathrm{d}\vec{r}\,' \tag{5-53}
$$

对势场散射问题，若式 (5-53) 右边积分中的 $\psi$ 取做势场为零时的零级近似的入射平面波 $\psi(\vec{r})\approx\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}$，则式 (5-53) 右边计算的 $\psi(\vec{r})$ 是向外散射的球面波，从中可以提取出散射振幅，正好是 Born 近似的结果。

式 (5-53) 给出的 $\psi(\vec{r})$ 是非齐次方程的特解，Schroedinger 方程的一般解应当是齐次方程 ($Q(\vec{r})$=0) 的通解加上非齐次方程的特解。对散射问题，齐次方程的通解被用来满足无穷远入射条件，而特解是用来确定由散射 (出射) 条件规定的向外球面波。第 6 章还要详细讨论这类边界条件问题的处理。

对于一般的波动方程

$$
\hat{H}\psi(x) = E\psi(x) \tag{5-54}
$$

考虑相应的 Green 函数的运动方程及其算符形式的解

$$
(\hat{H}-E)\hat{G} = -I \tag{5-55}
$$

$$
\hat{G} = \frac{1}{E-\hat{H}}I \tag{5-56}
$$

其谱分解可计算如下所示。考虑 $\hat{H}$ 的本征解

$$
\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n \tag{5-57}
$$

$\psi_n$ 满足正交、归一、完备性条件

$$
\langle\psi_n|\psi_m\rangle = \delta_{nm}, \quad \sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| = I \tag{5-58}
$$

由此得 Green 函数的谱分解 (Green 函数按 $\hat{H}$ 本征解的展开式)

$$\hat{G} = \sum |\psi_n\rangle \frac{1}{E - E_n} \langle \psi_n| \tag{5-59}$$

在坐标表象中，波函数为

$$\langle x|\psi_n\rangle = \psi_n(x), \langle \psi_n|x\rangle = \psi_n^*(x) \tag{5-60}$$

$\hat{G}$ 在坐标表象的矩阵元为

$$\langle x\hat{|}\hat{G}|x'\rangle = G(x - x') = \sum_n \frac{\psi_n(x)\psi_n^*(x')}{E - E_n} \tag{5-61}$$

对于自由粒子

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2, \quad \psi_k(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

由求和的连续过渡以及式 (5-58) 和式 (5-60) 得

$$\sum_n \to \int \mathrm{d}\vec{k}, \quad \langle \vec{r}|I|\vec{r}'\rangle = \int \frac{1}{(2\pi)^3} \int \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r})')}\mathrm{d}\vec{k} = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

又回到以前的结果。

### 5.3.2 多粒子系统的 Green 函数

1. 时间有关的 Schroedinger 方程及其 Green 函数

考虑时间有关的 Schroedinger 方程的 Green 函数，其运动方程为

$$\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}\right) G(x - x', t - t') = -\mathrm{i}\hbar\delta(x - x')\delta(t - t') \tag{5-62}$$

其形式解为

$$G(x - x', t - t') = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial t} - \hat{H}}\delta(x - x')\delta(t - t') \tag{5-63}$$

在 $\hat{H}$ 的本征表象中，

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n, \quad \delta(x - x') = \sum_n \psi_n(x)\psi_n^*(x') \tag{5-64}$$

$$\delta(t - t') = \frac{1}{2\pi}\int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varpi(t-t')}\mathrm{d}\varpi \tag{5-65}$$

$\hat{G}$ 的谱分解为

$$G(x - x', t - t') = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial t} - \hat{H}} \int \frac{\mathrm{d}\varpi}{2\pi} \sum_n \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varpi(t-t')}\psi_n(x)\psi_n^*(x')$$

$$= -\mathrm{i}\hbar \int \frac{\mathrm{d}\varpi}{2\pi} \sum_n \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varpi(t-t')} \frac{1}{\hbar\varpi - E_n} \psi_n(x)\psi_n^*(x')$$

$$= \sum_n \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar} \psi_n(x)\psi_n^*(x')\mathrm{e}^{\mathrm{i}E_n t'/\hbar} \tag{5-66}$$

从式 (5-66) 可知, Green 函数只依赖于时间差 $(t-t')$, 这是系统时间平移不变性的结果。可以证明，上述 Green 函数是时间演化算子在坐标空间的矩阵元，即

$$\hat{G}(t-t') = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}(t-t')/\hbar} \tag{5-67}$$

在坐标空间的矩阵元

$$\langle x|\hat{G}(t-t')|x'\rangle = \langle x|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}(t-t')/\hbar} \sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|x'\rangle$$

$$= \sum_n \langle x|\psi_n\rangle \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n(t-t')/\hbar} \langle\psi_n|x'\rangle$$

$$= \sum_n \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar} \psi_n(x)\psi_n^*(x')\mathrm{e}^{\mathrm{i}E_n t/\hbar} = G(x-x', t-t') \tag{5-68}$$

式 (5-68) 表示由 $\hat{H}$ 支配的物质波从点 $(x', t')$ 向点 $(x, t)$ 的传播。例如，初始时刻 $t' = t_0$ 时不是点源，而是一分布源 $\psi(x', t_0)$，则从 Green 函数的方程可得 (两边乘以 $\psi(x', t_0)$ 并对 $x'$ 积分)

$$\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}\right) \int \mathrm{d}x' G(x-x', t-t_0)\psi(x', t_0)$$

$$= -\mathrm{i}\hbar \int \mathrm{d}x' \delta(x-x')\delta(t-t_0)\psi(x', t_0) = -\psi(x, t_0)\delta(t-t_0) = 0, t-t_0 > 0,$$

$$\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}\right) \psi(x, t-t_0) = 0 \tag{5-69}$$

$$\psi(x, t-t_0) = \int G(x-x', t-t')\psi(x', t_0)\mathrm{d}x' = \int \langle x|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}(t-t_0)/\hbar}|x'\rangle\psi(x', t_0)\mathrm{d}x'$$

$$= \int \delta(x-x')\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}(t-t_0)/\hbar}\psi(x', t_0)\mathrm{d}x' = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}(t-t_0)/\hbar}\psi(x, t_0) \tag{5-70}$$

这正是初值为 $\psi(x, t_0)$ 的 Schroedinger 方程的解。因此，对时间有关的 Schroedinger 方程, Green 函数解法与通常解法是一致的.

考虑 $G(x-x', t-t_0)$ 对时间差 $(t-t')$ 的 Fourier 变换，

$$G(x-x', \varpi) = \int \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varpi\tau} G(x-x', \tau)\mathrm{d}\tau = \sum_n \psi_n(x)\psi_n^*(x') \int \mathrm{d}\tau \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\hbar\varpi - E_n)\tau/\hbar}$$

$$= -\mathrm{i}\hbar \sum_n \frac{\psi_n(x)\psi_n^*(x')}{\hbar\varpi - E_n} \tag{5-71}$$

式 (5-71) 表明时间有关 Green 函数对时间的 Fourier 变换包含了系统的全部定态信息：① 极点的位置给出本征能量；②极点处的留数函数给出本征波函数 $\psi_n(x)$，$\psi_n^*(x')$。

2. 多体系统的 Green 函数: 场论形式 (费米子系统)

在场论形式下, 多体系统的 Hamilton 量为

$$
\begin{aligned}
&\hat{H}=\int \mathrm{d}x\hat{\psi}^+(x)\hat{t}\hat{\psi}(x)+\frac{1}{2}\int \mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\hat{\psi}^+(x_1)\hat{\psi}^+(x_2)v(12)\hat{\psi}(x_2)\hat{\psi}(x_1),\\
&\{\hat{\psi}(x),\hat{\psi}^+(x')\}=\delta(x-x'),\\
&\{\hat{\psi}(x),\hat{\psi}(x')\}=\{\hat{\psi}^+(x),\hat{\psi}^+(x')\}=0
\end{aligned}
\tag{5-72}
$$

由式 (5-72)，可得场算符 $\hat{\psi}(x)$，$\hat{\psi}^+(x)$ 的运动方程 (Heisenberg 方程)

$$
\begin{aligned}
&\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\hat{\psi}(x,t)}{\partial t}=[\hat{\psi}(x,t),\hat{H}]=\hat{t}\hat{\psi}(x,t)+\int \mathrm{d}^4x'\hat{\psi}^+(x')v(x-x')\hat{\psi}(x')\hat{\psi}(x),\\
&v(x-x')=v(\vec{r}-\vec{r}')\delta(t-t')
\end{aligned}
\tag{5-73}
$$

其解为

$$
\hat{\psi}(x,t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}tt/\hbar}\hat{\psi}(x,0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}
\tag{5-74}
$$

其共轭方程及其解为

$$
\begin{aligned}
&\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\hat{\psi}^+(x,t)}{\partial t}=[\hat{\psi}^+(x,t),\hat{H}]=\hat{t}\hat{\psi}^+(x,t)+\int \mathrm{d}^4x'\hat{\psi}^+(x)\hat{\psi}^+(x')v(x-x')\hat{\psi}(x')\\
&\hat{\psi}^+(x,t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\hat{\psi}^+(x,0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}
\end{aligned}
\tag{5-75}
$$

设系统的状态为 $\varPsi$，则在 Heisenberg 表象中，单粒子 Green 函数的定义为

$$
G(xt,x',t')=(-\mathrm{i})\langle\varPsi|\hat{T}(\hat{\psi}(xt)\hat{\psi}^+(x't'))|\varPsi\rangle
\tag{5-76}
$$

二粒子 $\cdots$ 直至 $n$-粒子 Green 函数的定义为

$$
\begin{aligned}
&G_2(x_1t_1x_2t_2,x_1't_1',x_2't_2')\\
=&(-\mathrm{i})^2\langle\varPsi|\hat{T}(\hat{\psi}(x_1t_1)\hat{\psi}(x_2t_2)\hat{\psi}^+(x_2't_2')\hat{\psi}^+(x_1't_1'))|\varPsi\rangle\cdots\\
&G_n(x_1t_1x_2t_2\cdots x_nt_n,x_1't_1',x_2't_2'\cdots x_n't_n')=(-i)^n\langle\varPsi|\hat{T}(\hat{\psi}(x_1t_1)\hat{\psi}(x_2t_2)\\
&\cdots\hat{\psi}(x_nt_n;\hat{\psi}^+\hat{\psi}^+(x_n't_n')\cdots\hat{\psi}^+(x_2't_2')\hat{\psi}^+(x_2't_2'))|\varPsi\rangle
\end{aligned}
\tag{5-77}
$$

$\hat{T}$ 为编时乘积，按时间从小到大从右向左排列，场算符交换时，需考虑场算符的统计性，即玻色子场算符的对称性和费米子场算符的反对性。单粒子 Green 函数

$G(xt,x't')$ 代表一个粒子从点 $(x,t)$ 传播到点 $(x',t')$ 的过程。$n$-粒子 Green 函数 $G_n$ 则代表 $n$ 个粒子在时空中的传播。

若系统的状态是混合系综，处于 $\Psi_n$ 态的几率为 $w_n$，则定义 Green 函数时，要用对统计算符 $\hat{\rho}$ 的平均代替对 $\Psi_n$ 的平均，统计算符 $\hat{\rho}$ 为

$$\hat{\rho}=\sum_n w_n|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n| \tag{5-78}$$

对于正则分布

$$w_n=\mathrm{e}^{\zeta-E_n/kT},\quad \sum_n w_n=1 \tag{5-79}$$

这时 Green 函数定义为

$$\begin{aligned}&G_n(x_1t_1x_2t_2\cdots x_nt_n,x_1't_1',x_2't_2',...,x_n't_n') \qquad (5\text{-}80)\\ =&(-\mathrm{i})^n\mathrm{Tr}\hat{\rho}\hat{T}(\hat{\psi}(x_1t_1)\hat{\psi}(x_2t_2)\cdots\hat{\psi}(x_nt_n);\hat{\psi}^+(x_n't_n')\cdots x_2't_2')\hat{\psi}^+(x_1't_1'))/\mathrm{Tr}\hat{\rho}\\ =&(-\mathrm{i})^n\sum_m w_m\langle\Psi_m|\hat{T}(\hat{\psi}(x_1t_1)\hat{\psi}(x_2t_2)\cdots\hat{\psi}(x_nt_n);\hat{\psi}^+(x_n't_n')\cdots(x_2't_2')\hat{\psi}^+(x_1't_1'))|\Psi_m\rangle\end{aligned}$$

$n$-粒子 Green 函数与 $n$-粒子约化密度矩阵有如下关系：

$$\rho_n(12\cdots n;1'2'\cdots n')=(-\mathrm{i})^nG_n(12\cdots n;1'2'\cdots n')|_{\text{normal-equal-time-limit}} \tag{5-81}$$

Normal-equal-time-limit(正规等时极限) 定义为下列时序下的等时极限

$$t_n'\geqslant t_{n-1}'\geqslant\cdots\geqslant t_1'\geqslant t_1\geqslant t_2\geqslant\cdots\geqslant t_n$$

对单粒子情况，有

$$\rho(x,x';t)=-\mathrm{i}G(xt,x't+\varepsilon)=\mathrm{Tr}\hat{\rho}(\hat{\psi}^+(x't)\hat{\psi}(x,t)) \tag{5-82}$$

### 5.3.3 Green 函数的运动方程：多体关联 Green 动力学

从 $\hat{\psi}(x)$，$\hat{\psi}^+(x)$ 的运动方程可以得 $G_n$ 的运动方程组，对单粒子和二粒子 Green 函数运动方程组的显式为

$$\left[\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t_1}-\hat{t}(1)\right]G(1,1')=\delta^{(4)}(11')-\mathrm{i}\int\mathrm{d}^4x_2v(12)G_2(12;1'2^+) \tag{5-83}$$

$$\begin{aligned}\left[\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t_1}-\hat{t}(1)\right]G_2(12;1'2')=&\,\delta^{(4)}(11')G(22')-\delta^{(4)}(12')G(21')\\ &-\mathrm{i}\int\mathrm{d}^4x_3v(13)G_3(123;1'2'3^+)\end{aligned} \tag{5-84}$$

式中, 引进了四维 $\delta$-函数和四维坐标记号

$$\delta^{(4)}(12)=\delta^{(3)}(\vec{x}_1-\vec{x}_2)\delta(t_1-t_2) \tag{5-85}$$

$$2^+ = (x_2, t_2 + \varepsilon)$$

上述 Green 函数 $G_n$ 的运动方程称为 Martin-Schwinger 系列 (与 BBGKY 系列对应)，它们是从一个粒子的 Green 函数到 $A$ 个粒子的 Green 函数的耦合的链条式的方程组，完全等价于多体 Schroedinger 方程。与 BBGKY 系列一样, 其缺点是缺乏一个自然而合理的截断方案。类似于密度矩阵情况的做法，可以通过集团展开 (关联展开)，从 $G_n$ 中分离出关联成分 $G_{nc}$, 建立起关联 Green 函数 $G_{nc}$ 的运动方程[3,6,7]。

进行 $G_n$ 的集团展开, 分离出关联成份 $G_{nc}$ 具体做法如下：

$$\begin{aligned}
&G_2(12,1'2') = G_{2c}(12,1'2') + \underset{(2)}{AS}\, G(11')G(22') = G_{2c}(12,1'2') + G_{20}(12,1'2')\\
&G_3(123,1'2'3') = G_{3c}(123,1'2'3') + \underset{(3)}{AS}[\, G(11')G_{20}(23,2'3')\\
&\qquad + G_{2c}(12,1'2')G(3,3')] \cdots
\end{aligned} \tag{5-86}$$

把式 (5-86) 代入 $G_n$ 的运动方程组 (5-83) 和方程组 (5-84), 可以得到 $G_{nc}$ 的运动方程组

$$\begin{aligned}
&\left[\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t_1} - \hat{t}(1)\right] G(11') = \delta^{(4)}(11') - \mathrm{i}\int \mathrm{d}2v(12)[G_{2c}(12,1'2^+)\\
&\qquad + G(11')G(22^+) - G(12)G(21')]\\
&\left[\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t_1} - \hat{t}(1)\right] G_{2c}(121'2') = -\mathrm{i}\int \mathrm{d}3v(13)[-G_2(13,1'2')G(23) + G_{3c}(123,1'2'3^+)\\
&\qquad + G_{2c}(12,1'2')G(33^+) - G_{2c}(32,1'2')G(13)\\
&\qquad + G_{2c}(23,2'3^+)G(11') - G_{2c}(23,1'3^+)G(12')\\
&\qquad + G_{2c}(12,2'3)G(31') - G_{2c}(12,1'3)G(32')] \cdots
\end{aligned} \tag{5-87}$$

由于 $G_{nc}$ 随 $n$ 增加而迅速减小，上述方程组可以截断。在截断近似下，当 $G_{nc}$=0($n \geqslant$2)，得到平均场理论的全部结果，如 TDHF 和 HF。当 $G_{nc}$=0($n \geqslant$3) 时，得二体关联 Green 函数 (G 与 $G_{2c}$) 的运动方程组, 它们包括梯形图展开和环形图展开的全部结果，在正规等时极限下，化为二体关联密度矩阵的运动方程组。

### 5.3.4 多体系统基态的单粒子 Green 函数的 Lehmann 谱分解

设多体系统 $\hat{H}$ 的本征解为

$$\hat{H}\,\Psi_n = E_n\,\Psi_n \tag{5-88}$$

现计算 $A$ 粒子系统的基态的单粒子 Green 函数

$$G(xt,x',t') = (-\mathrm{i})\langle\,\Psi_0|\hat{T}(\hat{\psi}(xt)\hat{\psi}^+(x't'))|\,\Psi_0\rangle$$

$$= (-\mathrm{i})\langle \Psi_0|\hat{T}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\hat{\psi}(x0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\cdot \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t'/\hbar}\hat{\psi}^{+}(x'0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t'/\hbar})|\Psi_0\rangle \quad (5\text{-}89)$$

在式 (5-89) 最右边一等式中插入本征函数完备集构成的恒等算子

$$I = \sum_n |\Psi_n\rangle\langle\Psi_n| \quad (5\text{-}90)$$

得到

$$\begin{aligned}G(xt,x',t') =&(-\mathrm{i})\sum_n[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_n^{A+1}-E_0^A)(t-t')/\hbar}\langle\Psi_0|\hat{\psi}(x0)|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|\hat{\psi}^{+}(x'0))|\Psi_0\rangle\theta(t-t')\\&-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_n^{A-1}-E_0^A)(t'-t)/\hbar}\langle\Psi_0|\hat{\psi}(x0)|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|\hat{\psi}^{+}(x'0))|\Psi_0\rangle\theta(t'-t)]\end{aligned}$$

其中, 阶梯函数

$$\theta(\tau) = \begin{cases} 1, & \tau \geqslant 0, \\ 0, & \tau < 0 \end{cases} \quad (5\text{-}91)$$

对上述 Green 函数的时间坐标进行 Fourier 变换, 可得单粒子 Green 函数的 Lehmann 谱分解

$$\begin{aligned}G(x,x';\varpi) =& \int \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varpi\tau}\mathrm{d}\tau G(x,x';\tau)\\=&\sum_n\{_A\langle\Psi_0|\hat{\psi}(x0)|\Psi_n\rangle_{A+1\,A+1}\langle\Psi_n|\hat{\psi}^{+}(x'0))|\Psi_0\rangle_A\\&/[\hbar\varpi-(E_n^{A+1}-E_0^A)-\mathrm{i}\varepsilon]\\&+_A\langle\Psi_0|\hat{\psi}^{+}(x'0)|\Psi_n\rangle_{A-1\,A-1}\langle\Psi_n|\hat{\psi}(x0))|\Psi_0\rangle_A\\&/[\hbar\varpi+(E_n^{A-1}-E_0^A)+\mathrm{i}\varepsilon]\}\\=&\sum_n\{\psi_{pn}(x)\psi_{pn}^{*}(x')/[\hbar\varpi-\hbar\varpi_{pn}-\mathrm{i}\varepsilon]+\psi_{hn}(x)\psi_{hn}^{*}(x')\\&/[\hbar\overline{\omega}-\hbar\overline{\omega}_{hn}+\mathrm{i}\varepsilon]\}\end{aligned} \quad (5\text{-}92)$$

其中，单粒子激发态的波函数与激发能量为

$$\psi_{pn}(x) = {}_A\langle\Psi_0|\hat{\psi}(x0)|\Psi_n\rangle_{A+1}, \hbar\overline{\omega}_{pn} = E_n^{A+1}-E_0^A \quad (5\text{-}93\mathrm{a})$$

而单空穴激发态的波函数与激发能量为

$$\psi_{hn}(x) = {}_{A-1}\langle\Psi_n|\hat{\psi}(x0)|\Psi_0\rangle_A, \hbar\overline{\omega}_{hn} = E_0^A - E_n^{A-1} \quad (5\text{-}93\mathrm{b})$$

$\{E_n^A, |\Psi_n\rangle_A\}$ 表示粒子数为 $A$ 的系统的本征能量与本征波函数。因此，多体系统的单粒子 Green 函数 $G(x,x':\omega)$ 的极点给出 Fermi 面以上的单粒子激发能级和 Fermi 面以下的单空穴激发能级 (实际上是粒子性和空穴性的激子的能谱)，其留数函数给出相应的单粒子激发态和单空穴激发态的波函数 (激子的波函数)。

### 5.3.5 多体关联 Green 函数动力学的二次量子化表象形式

上述场论形式的 Green 函数，与量子场论中的 Green 函数在形式上相同。但是, 在固体物理中，人们还用二次量子化表象中的产生和消灭算子来定义 Green 函数 [13-17]。以 Anderson 模型为例, 其 Hamilton 量为

$$\hat{H} = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k \hat{n}_{k\sigma} + \sum_{\sigma} \varepsilon_{d\sigma} \hat{n}_{d\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{\sigma} \hat{n}_{d\sigma} \hat{n}_{d\bar{\sigma}} + \sum_{k\sigma} V_{kd} (C^+{}_{k\sigma} d_\sigma + C_{k\sigma} d_\sigma^+)$$
$$\hat{n}_{k\sigma} = C_{k\sigma}^+ C_{k\sigma}, \hat{n}_{d\sigma} = d_\sigma^+ d_\sigma \tag{5-94}$$

在 Heisenberg 表象，由产生、消灭算子组成的算子 $\hat{O}(C^+, C, d^+, d)$ 的时间演化由 Heisenberg 方程决定，

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial \hat{O}}{\partial t} = [\hat{O}, \hat{H}] \tag{5-95}$$

其解为

$$\hat{O}(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar} \hat{O}(0) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar} \tag{5-96}$$

在 Heisenberg 表象，两个算子 $\hat{A}(t)$ 和 $\hat{B}(t')$ 的 Green 函数定义为

$$\langle\langle \hat{A}(t); \hat{B}(t') \rangle\rangle = -\mathrm{i}\theta(t-t') \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(t')] \rangle_\pm \tag{5-97}$$

对 Fermi 型算子 $\hat{A}(t), \hat{B}(t')$，取反对易子 $[,]_+$，对 Bose 型算子，取对易子 $[,]_-$。平均值定义为量子统计力学的平均

$$\langle \hat{O} \rangle = \mathrm{Tr} \hat{\rho} \hat{O} \tag{5-98}$$

$\langle \cdots \rangle$ 表示双重平均，统计平均和量子力学平均。

由 $\hat{A}(t), \hat{B}(t')$ 的运动方程可以求得它们的 Green 函数的运动方程

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \langle\langle \hat{A}(t), \hat{B}(t') \rangle\rangle = \delta(t-t')\hbar \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(t')]_\pm \rangle + \theta(t-t') \langle [[\hat{A}(t), \hat{H}]_-, \hat{B}(t')]_\pm \rangle \tag{5-99}$$

对时间差 $(t-t')$ 进行 Fourier 变换，可得

$$\varpi \langle\langle \hat{A}; \hat{B} \rangle\rangle_\varpi = \langle [\hat{A}, \hat{B}]_\pm \rangle + \langle\langle [[\hat{A}, \hat{H}]_-; \hat{B}] \rangle_\varpi \tag{5-100}$$

同样可以建立起 $\langle\langle [[\hat{A}, \hat{H}]_-; \hat{B}] \rangle\rangle_\varpi$ 的运动方程，它涉及新的 Green 函数，从而形成各种 Green 函数的耦合的运动方程组链。像坐标空间的 Green 函数一样，对高阶 Green 函数也可以作集团展开，分离出关联成分, 得到关联 Green 函数的运动方程组链；然后对高阶关联 Green 函数做截断近似，得到一个有限数目的、封闭的方程组，可以进行求解。

对 Anderson 模型 (5-94), 设 $\hat{A}=d_\sigma, \hat{B}=d_\sigma^+$，则有

$$\begin{aligned}
&(\overline{\omega}-\varepsilon_{d\sigma})\langle\langle d_\sigma; d_\sigma^+\rangle\rangle = 1+\sum_k V_{kd}\langle\langle C_{k\sigma}; d_\sigma^+\rangle\rangle + U\langle\langle \hat{n}_{d\bar{\sigma}} d_\sigma; d_\sigma^+\rangle\rangle \\
&(\overline{\omega}-\varepsilon_{k\sigma})\langle\langle C_{k\sigma}; d_\sigma^+\rangle\rangle = V_{kd}\langle\langle d_\sigma; d_\sigma^+\rangle\rangle
\end{aligned} \tag{5-101}$$

$$\begin{aligned}
\langle\langle \hat{n}_{d\bar{\sigma}} d_\sigma; d_\sigma^+\rangle\rangle =& n_{d\sigma} + U\langle\langle \hat{n}_{d\bar{\sigma}} d_\sigma; d_\sigma^+\rangle\rangle + \sum_k V_{kd}\langle\langle \hat{n}_{d\bar{\sigma}} C_{k\sigma}; d_\sigma^+\rangle\rangle \\
&+\sum_k V_{kd}(\langle\langle d_{\bar{\sigma}}^+ C_{k\sigma} d_\sigma; d_\sigma^+\rangle\rangle - \langle\langle C_{k\bar{\sigma}}^+ d_{\bar{\sigma}} d_\sigma; d_{\bar{\sigma}}^+\rangle\rangle)
\end{aligned}$$

对右边出现的新的 Green 函数，也可建立其运动方程，然后对各个高阶 Green 函数作集团展开，得到各阶关联 Green 函数的运动方程组; 在所希望的阶截断它们，就可求解封闭的方程组。在求得 $G_d(\overline{\omega})=\langle\langle d_\sigma; d_\sigma^+\rangle\rangle$ 之后，就可以用它计算各种物理量 [13−17]。

## 5.4　量子统计力学初步

本章介绍的密度矩阵理论和 Green 函数理论，特别适合于处理混合系综, 而量子统计力学的研究对象正是量子混合系综。

量子统计力学分为非平衡态统计力学与平衡态统计力学两大类。本章的内容为二者准备了必要的量子力学和量子统计力学理论基础知识，在此基础上不难深入学习和掌握量子统计力学更高深的内容。下面对量子统计力学的最重要的内容进行简要介绍 [10−12]。

如果多体系统的统计算符 $\hat{\rho}$ 取成统计热力学系综，如正则系综

$$\hat{\rho}=\mathrm{e}^{\zeta-\hat{H}/kT} \tag{5-102}$$

或巨正则系综

$$\hat{\rho}=\mathrm{e}^{\zeta-\hat{H}/kT-\mu\hat{N}} \quad (\hat{N}\text{是粒子数算符}) \tag{5-103}$$

运用上述统计算符确定密度矩阵的初始统计权重 $w_n$ 或 Green 函数的统计平均算符 $\rho$, 则由密度矩阵或 Green 函数所得的结果就是量子统计力学平衡态的结果。如果不用式 (5-102) 或式 (5-103) 确定密度矩阵的初始统计权重 $w_n$ 或 Green 函数的统计平均算符 $\rho$, 则所得结果是非平衡态量子统计力学的结果。

### 5.4.1　非平衡态统计力学

1. 主方程——基于密度矩阵的讨论

非平衡态量子统计力学研究一个量子多体系统从非平衡态趋向平衡态的时间演化过程。由于这一演化是由量子动力学规律趋动的，故它可以用 von Neumann

方程来描述。因为量子统计力学的任务是从微观量计算宏观统计热力学量，为此,必须对时空和物理量建立起微观大，宏观小的标准和概念，即对系统的力学量及其平均值如能量、动量等, 以及对时间、空间坐标, 按如下要求选择一个微观大，宏观小的区间。这个区间 $(\Delta E, \Delta P, \Delta t，\Delta r, \cdots)$ 在微观上必须足够大，以至于包含成千上万个粒子的贡献，因而可以做统计平均；而这个区间在宏观上又必须足够小,因而可以进行宏观意义上的微分运算，从而建立起用微分方程表示的宏观统计热力学定律。

从多体系统的 von Neumann 方程出发，用我们要研究的物理量 $v$ 来标志多体系统的状态 $\Psi_\nu$，把这些物理量的空间分成微观大，宏观小的格子，然后把 von Neumann 方程按这些格子离散化，并对每个格子内的微观状态求平均，就可以得到宏观量在 $\nu \to \nu + \Delta\nu$ 区间内的分布几率 $P_\nu \Delta\nu$ 随时间演化的方程

$$\frac{\mathrm{d}P_\nu}{\mathrm{d}t} = \sum_\mu W_{\nu\mu} P_\mu - \sum_\mu W_{\mu\nu} P_\nu \tag{5-104}$$

这是有名的主方程 (master equation)[10]，其中 $W_{\nu\mu}$ 是从 $\nu \to \mu$ 的转移几率。从主方程可以得到对转移几率矩展开到二阶近似的输运方程，如 Fokker-Planck 方程。由于主方程描述宏观量 $v$ 的分布几率密度 $P_\nu$ 趋于平衡的过程，它蕴含熵增加定理：从熵 $S = -k\sum\limits_\nu P_\nu \ln P_\nu$ 和主方程可证明熵随时间总是增加，$S$ 极大时，$P_\nu = 1/N \to S = k\ln N$($N$–状态数), 这正是微正则分布的结果。

主方程从系统的总体性质出发, 去描述系统整体性质趋于平衡的过程, 这是非平衡态量子统计力学的宏观描述一端。下面介绍的 Boltzman-Uehling-Uhlenbeck (BUU) 方程则是从系统的单粒子密度在相空间的分布出发, 去描述系统的单粒子密度相空间分布函数趋于平衡的过程, 这是非平衡态量子统计力学的另一端 —— 微观描述一端。

2. BUU 方程

多体系统在相空间的单粒子密度分布函数 $f(\vec{r}, \vec{p}; t)$ 对描述系统的非平衡过程也是非常有用的; 而 $f(\vec{r}, \vec{p}; t)$ 随时间演化的非平衡态方程，可以从二体关联动力学方程得到。从 $\rho$ 和 $C_2$ 的方程出发，在 Born 近似 (或 $G$ 矩阵近似) 下求得 $C_2$ 作为 $\rho$ 的泛函解 $C_2 = C_2[\rho]$，代入 $\rho$ 的运动方程，得到

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\rho}{\partial t} = [h, \rho] + \mathrm{Tr}[v(12), A\rho\rho + C_2[\rho]] \tag{5-105}$$

对 $\rho(\vec{r}, \vec{r}'; t)$ 进行 Winger 变换

$$f(\vec{R}, \vec{P}, t) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int \rho\left(\vec{R} + \frac{\vec{r}}{2}, \vec{R} - \frac{\vec{r}}{2}, t\right) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{P}\cdot\vec{r}/\hbar}\mathrm{d}\vec{r} \tag{5-106}$$

$(\vec{R},\vec{P})$ 是半经典近似下粒子在相空间的坐标和动量。在半经典近似和局域碰撞近似下，就可以得到包括平均场和碰撞项的单粒子密度分布函数 $f(\vec{r},\vec{p};t)$ 的输运方程 (BUU 方程)[11]，

$$\frac{\partial f(\vec{R},\vec{P},t)}{\partial t}-\frac{\vec{P}}{m}\vec{\nabla}_R f(\vec{R},\vec{P},t)+\vec{\nabla}_R U(\vec{R})\cdot\vec{\nabla}_P f(\vec{R},\vec{P},t)=I_{\text{coll}} \tag{5-107}$$

$$\begin{aligned}I_{\text{coll}} \approx &\frac{1}{(2\pi)^9}\int \mathrm{d}\vec{P}'\mathrm{d}\vec{P}_1\mathrm{d}\vec{P}_2|\langle PP'|v|P_1P_2\rangle|^2 \\ &\cdot[f(RP_1)f(RP_2)(1-f(RP))(1-f(RP')) \\ &-(1-f(RP_1))(1-f(RP_2))f(RP)f(RP')]\quad \delta(\vec{P}+\vec{P}'-\vec{P}_1-\vec{P}_2)\end{aligned} \tag{5-108}$$

式中, 右边第一项是 $f(\vec{R},\vec{P},t)$ 的获得项 (gain term), 第二项是 $f(\vec{R},\vec{P},t)$ 的丢失项 (loss term), 碰撞矩阵元 $|\langle PP'|v|P_1P_2\rangle|^2$ 可以用碰撞截面来表示, $\delta(\vec{P}+\vec{P}'-\vec{P}_1-\vec{P}_2)$ 表示局域碰撞近似下动量守恒。碰撞项的 Pauli 阻塞效应如图 5-1 所示。$U(\vec{R})$ 是多体系统的平均场, 可以从二体相互作用对单粒子分布函数的平均得到。

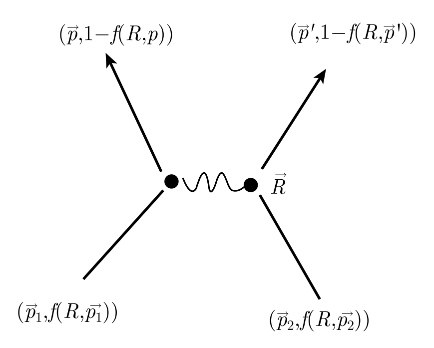



图 5-1 碰撞项的 Pauli 阻塞效应

BUU 方程能很好地描述费米子的相空间密度分布函数 $f(\vec{R},\vec{P},t)$ 趋于平衡的过程，它的平衡态解是 Fermi–Dirac 分布。用 BUU 方程描述重离子核反应过程很成功。

### 5.4.2 平衡态统计力学

对平衡态统计力学, 我们也介绍它的宏观描述和微观描述的重要的两端：对描述整个系统有用的统计热力学微扰论，对描述系统中的单粒子态有用的微观粒子的温度有关的平均场理论[12]。

1. 统计热力学微扰论

设多体系统的 $\hat{H}$ 可分解成两部分 $\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}_1$,$\hat{H}_0$ 是容易求解的部分，包含自洽平均场的独立粒子系统的 Hamilton 量；$\hat{H}_1$ 是微扰项, 包含剩余相互作用。系

统的平衡态统计算符为

$$\hat{\rho} = \mathrm{e}^{\zeta - \hat{H}\beta}, \quad \beta = 1/kT \tag{5-109}$$

对 $\hat{\rho}$ 可以建立起虚时 $(t \to -\mathrm{i}\tau)$ 的 Schroedinger 方程

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial \tau} = -\hat{H}\hat{\rho} \to \mathrm{d}\hat{\rho}/\hat{\rho} = -\hat{H}\mathrm{d}\tau \tag{5-110}$$

其解为

$$\ln\hat{\rho} = \zeta - \hat{H}\tau, \quad \hat{\rho} = \mathrm{e}^{\zeta - H\tau} \tag{5-111}$$

统计算符

$$\hat{\rho}(\beta) = \mathrm{e}^{\zeta - \hat{H}\beta} \tag{5-112}$$

是虚时为 $\beta$ 的解。设

$$\hat{\rho}(\tau) = \mathrm{e}^{\zeta - \hat{H}_0\tau}\hat{\rho}_{\mathrm{int}}(\tau)$$

可得 $\hat{\rho}_{\mathrm{int}}$ 的运动方程

$$\frac{\partial \hat{\rho}_{\mathrm{int}}}{\partial \tau} = -\hat{H}_1(\tau)\hat{\rho}_{\mathrm{int}}(\tau), \quad \hat{H}_1(\tau) = \mathrm{e}^{\hat{H}_0\tau}\hat{H}_1\mathrm{e}^{-\hat{H}_0\tau} \tag{5-113}$$

由

$$\hat{\rho}(0) = \mathrm{e}^{\zeta} = \mathrm{e}^{\zeta}\hat{\rho}_{\mathrm{int}}(0) \tag{5-114}$$

知

$$\hat{\rho}_{\mathrm{int}}(0) = 1 \tag{5-115}$$

用迭代法求得

$$\hat{\rho}_{\mathrm{int}}(\tau) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty}(-1)^n \int_0^{\tau}\mathrm{d}\tau_1\int_0^{\tau_1}\mathrm{d}\tau_2\cdots\int_0^{\tau_{n-1}}\mathrm{d}\tau_n\hat{H}_1(\tau_1)\hat{H}_1(\tau_2)\cdots\hat{H}_1(\tau_n) \tag{5-116}$$

$$\begin{aligned}\hat{\rho}(\beta) &= \mathrm{e}^{\zeta - \hat{H}_0\beta} \\ &= \mathrm{e}^{\zeta - \hat{H}_0\beta}\left[1 + \sum_{n=1}^{\infty}(-1)^n\int_0^{\beta}\mathrm{d}\tau_1\int_0^{\tau_1}\mathrm{d}\tau_2\cdots\int_0^{\tau_{n-1}}\tau_n\hat{H}_1(\tau_1)\hat{H}_1(\tau_2)\cdots\hat{H}_1(\tau_n)\right]\end{aligned} \tag{5-117}$$

热力学函数 $\Omega$ 定义为

$$\mathrm{e}^{-\beta\Omega} = \mathrm{Sp}\mathrm{e}^{-\hat{H}\beta} = \sum_n \mathrm{e}^{-\beta E_n}\langle\Psi_n|\Psi_n\rangle \tag{5-118}$$

其微扰论表示为

$$\Omega = -\frac{1}{\beta}\ln \mathrm{Sp}\Big\{\mathrm{e}^{-\hat{H}_0\beta}\Big[1+\sum_{n=1}^{\infty}(-1)^n\int_0^{\beta}\mathrm{d}\tau_1\int_0^{\tau_1}\mathrm{d}\tau_2 \cdots\int_0^{\tau_{n-1}}\mathrm{d}\tau_n \hat{H}_1(\tau_1)\hat{H}_1(\tau_2)\cdots\hat{H}_1(\tau_n)\Big]\Big\}$$
$$= -\frac{1}{\beta}\Big\{\ln \mathrm{Sp}\Big(\mathrm{e}^{-\hat{H}_0\beta}\Big)\Big[1+\sum_{n=1}^{\infty}(-1)^n\int_0^{\beta}\mathrm{d}\tau_1\int_0^{\tau_1}\mathrm{d}\tau_2 \cdots\int_0^{\tau_{n-1}}\mathrm{d}\tau_n \hat{u}_n(\tau_1\tau_2\cdots\tau_n)\Big]\Big\} \tag{5-119}$$

$$\hat{u}_n(\tau_1\tau_2\cdots\tau_n) = \mathrm{Sp}(\mathrm{e}^{-\hat{H}_0\beta}\hat{H}_1(\tau_1)\hat{H}_1(\tau_2)\cdots\hat{H}_1(\tau_n)) \tag{5-120}$$

$$\hat{H}_1(\tau) = \mathrm{e}^{H_0\tau}\hat{H}_1\mathrm{e}^{-H_0\tau} \tag{5-121}$$

由 $\Omega$ 的各级微扰近似, 可以计算各种统计热力学量。

2. 温度有关的平均场理论 [12]

设系统的 Hamilton 量为

$$\hat{H} = \sum_{ij} t_{ij}a_i^+a_j + \frac{1}{4}\sum_{ijkl} v_{ijkl}a_i^+a_j^+a_la_k \tag{5-122}$$

其中动能和势能的矩阵元为

$$t_{ij} = \langle i|\hat{t}|j\rangle, \quad v_{ijkl} = \langle ij|v|kl\rangle - \langle ij|v|lk\rangle \tag{5-123}$$

把 $\hat{H}$ 分成两部分，$\hat{H}_0$ 为平均场部分，$\hat{H}_1$ 为剩余相互作用

$$\hat{H} = \hat{H}_0(x) + \hat{H}_1(x) \tag{5-124}$$

矩阵变量 $x$ 是引进的平均场的变分参数, 以后由平均近似的条件确定, 而 $\hat{H}$ 与 $x$ 无关。其中,

$$\hat{H}_0(x) = \frac{1}{4}\sum_{ijkl} v_{ijkl}2x_{il}x_{jk} + \sum_{ij} t_{ij}a_i^+a_j + \frac{1}{2}\sum_{ijkl} v_{ijkl}[a_i^+a_lx_{jk} + a_j^+a_kx_{il}] \tag{5-125a}$$

$$\hat{H}_1(x) = -\frac{1}{4}\sum_{ijkl} v_{ijkl}(a_i^+a_l + x_{il})(a_j^+a_k + x_{jk}) - \frac{1}{4}\sum_{ijkl} v_{ijkl}a_i^+a_la_j^+a_k$$
$$-\frac{1}{4}\sum_{ijkl} v_{ijkl}[a_i^+a_lx_{jk} + a_j^+a_kx_{il}] - \frac{1}{4}\sum_{ijkl} v_{ijkl}x_{il}x_{jk} \tag{5-125b}$$

作变换

$$a_i^+ = \sum_\alpha u_{i\alpha}^* b_\alpha^+, \quad a_i = \sum_\alpha u_{i\alpha} b_\alpha \tag{5-126a}$$

其逆变换为

$$b_\alpha^+ = \sum_\alpha u_{i\alpha} a_i^+, \quad b_\alpha = \sum_\alpha u_{i\alpha}^* a_i \tag{5-126b}$$

由幺正变换条件

$$\sum_i u_{i\alpha}^* u_{i\beta} = \delta_{\alpha\beta}, \quad \sum_\alpha u_{i\alpha}^* u_{j\alpha} = \delta_{ij} \tag{5-126c}$$

有

$$\{a_i, a_j^+\} = \delta_{ij} \to \{b_\alpha, b_\alpha^+\} = \delta_{\alpha\beta} \tag{5-127}$$

统计热力学自洽平均场条件是零温基态自洽平均场条件的统计热力学推广。

(1) 零温时基态波函 $|\varPsi_0\rangle$ 的归一化条件对变分参数的变分为零。推广后, 相当于系统所有本征态波函数 $|\varPsi_n\rangle$ 的归一化条件的统计热力学平均即热力学势 $\varOmega_0(x)$ [式 (5.118)], 也应该对变分参数 $x = \{x_{il}\}$ 的变分为零。

$$\frac{\partial\langle \varPsi_0(x)|\varPsi_0(x)\rangle}{\partial x_{il}} = 0 \to \frac{\partial \varOmega_0}{\partial x_{il}} = -\frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial x_{il}}\ln \mathrm{Sp}\left(\mathrm{e}^{-\hat{H}_0'\beta}\right) = \frac{\mathrm{Sp}\left(\mathrm{e}^{-\hat{H}_0'\beta}\dfrac{\partial \hat{H}_1}{\partial x_{il}}\right)}{\mathrm{Sp}(\mathrm{e}^{-\hat{H}_0'\beta})} = 0 \tag{5-128a}$$

(2) 零温时基态能量对变分参数的变分极小, 导致基态波函数 $|\varPsi_0\rangle$ 对一级微扰 $\hat{H}_1$ 的平均值为零。推广后, 系统能量的统计热力学平均对变分参数的变分极小, 应导致系统所有本征态 $|\varPsi_n\rangle$ 对一级微扰 $\hat{H}_1$ 的热力学平均值为零。

$$\langle \varPsi_0|\hat{H}_1|\varPsi_0\rangle = 0 \to \langle \hat{H}_1\rangle = \mathrm{Sp}(\mathrm{e}^{-\hat{H}_0'\beta}\hat{H}_1) = 0 \tag{5-128b}$$

由于二次量子化表象中粒子数可变，故应用 Lagrange 乘子法包含粒子数平均值的约束条件，这时用于条件变分的能量泛函中的 Hamilton 量，应包含反映粒子数平均值守恒的 Lagrange 乘子项

$$\hat{H}_0' = \hat{H}_0 - \lambda\hat{N}, \quad \hat{N} = \sum_i a_i^+ a_i \tag{5-129}$$

由此可得统计热力学自洽场方程：由粒子数条件定出 Fermi 能

$$\langle \hat{N}\rangle = \sum_{i\alpha} u_{i\alpha}^* u_{i\alpha}\frac{\mathrm{e}^{-E_\alpha\beta}}{1+\mathrm{e}^{-E_\alpha\beta}} = A \to \lambda = \varepsilon_f \tag{5-130}$$

由变分条件 (5-128) 得到自洽场方程

$$\sum_j \left[t_{ij} + \sum_{klm} v_{ikjl} u_{k\gamma}^* u_{l\gamma} \frac{\mathrm{e}^{-E_\gamma \beta}}{1+\mathrm{e}^{-E_\gamma \beta}}\right] u_{j\alpha} = \varepsilon_\alpha u_{i\alpha} \rightarrow \{\varepsilon_\alpha, u_{i\alpha}\} \tag{5-131}$$

$$\varepsilon_\alpha = E_\alpha + \lambda, \quad E_\alpha = \varepsilon_\alpha - \lambda \tag{5-132}$$

式中 $E_\alpha$ 是 $H_0$ 对角化后的单粒子能量, $\varepsilon_f(\beta), \varepsilon_\alpha(\beta), u_{i\alpha}(\beta)$ 与 $\beta = \dfrac{1}{kT}$有关。式 (5-130)~ 式 (5-132) 就是温度有关的自洽平均场方程组, 应联立自洽求解, 获得 $\varepsilon_f(\beta), \varepsilon_\alpha(\beta), u_{i\alpha}(\beta)$。

温度有关的平均场方程也可从密度矩阵理论的 HF 近似推得, 只须在单粒子密度矩阵中使用温度不为零的单粒子态的 Fermi–Dirac 分布。所得温度不为零的 HF 方程为

$$\hat{h}\psi_\alpha = \varepsilon_\alpha \psi_\alpha$$

$$\hat{h} = \hat{t} + U_{\mathrm{HF}}$$

$$U_{\mathrm{HF}}\rho = \int v(12)[\rho(11)\rho(22) - \rho(12)\rho(21)]\mathrm{d}2 \tag{5-133}$$

$$\rho = \sum_\alpha n_\alpha \psi_\alpha \psi_\alpha^*$$

$$n_\alpha = \frac{1}{1+\mathrm{e}^{(\varepsilon_\alpha - \lambda)\beta}}$$

Fermi 能级 $\varepsilon_f$ 用粒子数方程确定

$$\sum_\alpha \frac{1}{1+\mathrm{e}^{(\varepsilon_\alpha - \lambda)\beta}} = A \rightarrow \lambda = \varepsilon_f \tag{5-134}$$

式中 $\varepsilon_f(\beta), \varepsilon_\alpha(\beta), \psi_\alpha(\beta)$ 与 $\beta = \dfrac{1}{kT}$有关，$n_\alpha$ 是单粒子密度矩阵 $\rho$ 中包含的单粒子的 Fermi–Dirac 分布。式 (5-133) 和式 (5-134) 必须联立自洽求解, 获得 $\varepsilon_f(\beta), \varepsilon_\alpha(\beta)$, $\psi_\alpha(\beta)$。

固体的物理量都是在有限温度下测得的。因此, 严格说来, 能带论应当建立在温度有关的平均理论之上, 才是合理的。现代的能带论计算已经考虑到这个问题。

# 参 考 文 献

[1] Fetter A L, Walecka J D. Quantum Theory of Many-Particle System. New York：McGraw-Hill, 1971.

[2] 普里戈京. 非平衡态统计力学. 上海：上海科学技术出版社, 1984.

[3] 王顺金，左维，郭华. 原子核多体关联动力学–量子多体理论的一种非微扰途径. 物理学进展, 1996, 16(1)：99.

[4] Wang S J, Cassing W. Explicit treatment of $N$-body correlations within a density matrix formalism. Ann Phys, 1985, 159：328.

[5] Wang S J, Li B A, Bauer W, et al. Relativistic transport theory for hadronic matter. Ann Phys, 1991, 209：251.

[6] Liu J Y, Wang S J, Di Toro M, et al. Two-body correlation transport theory for heavy-ion collisions. Nucl Phys, 1996, A604：341.

[7] Wang S J, Zuo W, Cassing W. Correlation dynamics of Green′s functions. Nucl Phys, 1994, A573：245.

[8] Wang S J, Cassing W, Haeuser J M, et al. Constrained correlation dynamics of SU(N) gauge theories. Ann Phys, 1995, 242：245.

[9] Wang S J, An J H, Luo H G, et al. Dynamical symmetry and analytical solutions of the nonautonomous quantum master equation of the dissipative two-level system-decoherence of quantum register. J Phys, 2003, A368：29–840.

[10] 徐躬耦. 高能的物理与核物理. 1978, 2(4)：359–367.

[11] Cassing W, Metag V, Mosel U, et al. Phys Reps, 1990, 188：363.

[12] 王顺金. 温度不为零的自洽场方程-HFB 方程的推广. 高能物理与核物理, 1981, 5(1)：92.

[13] Luo H G, Ying Z J, Wang S J. Equation of motion approach to the solution of Anderson model. Phys Rev, 1999, B59：9710.

[14] Luo H G, Wang S J. Specific heat of the periodic Anderson model at finite U. Phys Rev, 2000, B62：1485–1488.

[15] Luo H G, Wang S J. Moment conserving decoupling approach for many-body systems. Phys Rev, 1999, II5, B60(23)：480–483.

[16] Luo H G, Wang S J. Higher order correlation effects to the solution of the Hubbard model. Phys Rev, 2000, II, B61(8)：5158–5168.

[17] Luo H G, Wang S J. Equation of motion approach to two-dimensional Hubbard model. Phys Rev, 2000,B61：13418–13423.

# 第 6 章　碰撞、散射和反应的量子多体理论：光学模型、直接反应和散射矩阵

## 6.1　碰撞、散射和反应问题

前面几章讲的是结合态本征值问题或结合态系综问题。这是量子多体系统的负能态、间断能谱的问题。本章要讨论原子系统或原子核系统的碰撞问题，这是量子多体系统的正能态、连续能谱问题，是一个非结合态问题，比负能结合态问题要复杂得多[1−4]。希望本章的内容能给从事原子核或原子碰撞问题研究的人员提供一个坚实的理论基础。

### 6.1.1　结合态本征值问题与非结合态碰撞问题: 结构问题与碰撞问题

我们现在研究两个粒子的碰撞问题。入射粒子 (又称炮弹, 如电子、质子、中子等基本粒子或原子，原子核等复杂粒子) 与靶粒子 (多数是复杂粒子) 相互碰撞，可以发生复杂的过程。以质子 p 与原子核碰撞为例，当质子在质心系中的动能 $E_{\mathrm{p}}$ 低于 Coulomb 位垒 $V_{\mathrm{c}}$ 时，质子在靶核的 Coulomb 场中运动，不能进入原子核, 只能发生 Putherforad 弹性散射或通过 Coulomb 场引起原子核内部激发 (称为 Coulomb 激发)。当 $E_{\mathrm{p}} > V_{\mathrm{c}}$ 时，质子可以进入靶核内部，核力开始发挥作用。这时，除了发生不损失能量只改变动量方向的弹性散射 $(\mathrm{p},\mathrm{p})$ 外，还可以发生损失能量的非弹性散射 $(\mathrm{p},\mathrm{p}')$，发射氘核的拾取反应 $(\mathrm{p},\mathrm{d})$ 或打出中子的电荷交换反应 $(\mathrm{p},\mathrm{n})$ 等直接反应过程；还可以与靶核内的众核子发生多次碰撞，直至损失足够多的能量而停留在靶核中 (被靶核吸收) 而形成复合核；然后发生复合核衰变，发射 $\gamma,\mathrm{p},\mathrm{p}',\mathrm{d},\mathrm{n},\alpha$ 等及重粒子 (图 6-1)。

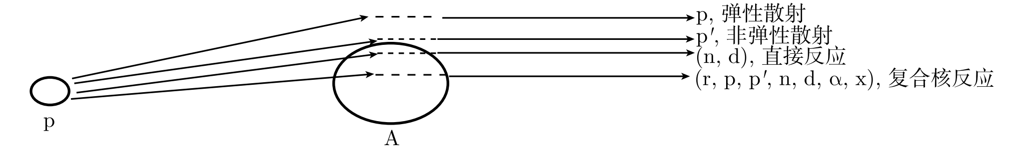



图 6-1　质子与原子核碰撞时发生的各种过程

### 6.1.2　势场散射与光学模型

把不经过复合核阶段而在核外发生的弹性散射称为形状弹性散射或势场散射，

其特点是靶核内部的自由度被冻结而靶核作为一个整体只给质子提供一个散射势场 $U_0(\vec{r})$，质子在这个势场中运动而发生偏折，其动量方向改变而相对运动动能却不改变。核子具有波动性，质子在势场 $U_0(\vec{r})$ 中的散射，正像光波在不均匀介质中的折射。势场 $U_0(\vec{r})$ 起着折射系数 $n_0(\vec{r})$ 的作用。除势场散射外，质子引起的其他反应过程的共同特点是入射质子 p 在反应过程中或者其原有特性消失, 或者变成别的，或者入射质子被靶核吸收。这一过程正像光波在不均匀介质中被折射的同时还被介质吸收。在光学中，光波通过介质包括折射和吸收两种过程, 光的折射用折射系数的实部 $n_0(\vec{r})$ 来描述, 而光的吸收则用折射系数的虚部 $n_{\rm i}(\vec{r})$ 来描述，总的折射系数包括折射系数和吸收系数两种成分, 故为复函数 $n(\vec{r}) = n_0(\vec{r}) + {\rm i}n_{\rm i}(\vec{r})$。类似地，质子的非弹性过程 (类似被吸收的过程) 也可以用势场的虚部 $W(\vec{r})$ 来描述，而总的势场 $U = U_0 + {\rm i}W$ 也是复的，称光学势。这样，通过与光学的类比，我们实现了质子在靶核介质中散射与吸收过程的光学模型描述。

通过上述分析可以看出，光学模型对质子的势场弹性散射作了精确细致的描述，而对势场弹性散射以外的复杂过程只当作吸收过程处理而只作了笼统的描述。质子在原子核上的弹性散射和非弹性过程的光学类比见表 6-1。

**表 6-1 质子在原子核上的弹性散射和非弹性过程的光学类比**

| 入射粒子 | 介质 | 控制过程的物理量 | 运动方程 | 过程结果 |
|---|---|---|---|---|
| 质子–de Borgolie 波 | 原子核 | 光学势 | Schroedinger 方程 | 散射与吸收 |
| 光子–电磁波 | 电磁介质 | 折射系数 | Maxwell 方程 | 折射与吸收 |

应当指出, 上述质子与原子核碰撞的光学模型描述, 具有更为普遍的意义。任何微观粒子与复杂靶的碰撞, 在平均场近似有效的条件下, 都会导致光学模型的描述, 只不过因光学势的好坏程度和复杂程度不同, 导致不同好坏程度和复杂程度的光学模型描述而已。因此, 光学模型是两个微观量子多体系统相互碰撞过程中, 平均场近似的自然结果, 是结合态平均场理论向散射态平均场理论的推广。从本质上说, 光学模型就是散射问题中的平均场理论。在下面讨论关于光学模型的微观多体理论基础时, 特别是讨论重离子碰撞的平均场理论时, 可以清楚地了解这一点。因此, 光学模型的基本概念, 超出了核物理的范围, 会在其他相关领域找到用途。

### 6.1.3 反应过程及其特点

仔细分析质子被吸收的过程，就会发现它包含各种复杂的反应过程。例如, 入射质子通过与靶内的质子的 Coulomb 相互作用使靶核内部发生激发 (Coulomb 激发)，质子与靶核内核子碰撞而打出质子或中子导致 $({\rm p},{\rm p}')$ 反应和 $({\rm p},{\rm n})$ 反应，从靶核拾取一个中子而形成氘核产生 $({\rm p},{\rm d})$ 反应，以及与靶核内众核子多次碰撞而被靶核吸收最后形成复合核等过程。

上述反应过程的特点是随着碰撞能量的增加，碰撞涉及的粒子数或自由度数目也相应地增加。势场散射时, 入射粒子和靶粒子的内部自由度都冻结了，涉及的自由度最少。反应过程必然涉及内部自由度的参与，我们把涉及很少内部自由度的反应过程称为直接反应过程, 如 $(\mathrm{p},\mathrm{p}'),(\mathrm{p},\mathrm{n}),(\mathrm{p},\mathrm{d})$ 反应等都是直接反应过程。形成复合核时，几乎所有内部自由度都参与了。在直接反应过程与形成复合核过程之间，涉及中等数目的内部自由度，称为中间过程反应。

上述对反应过程及其特点的分析具有普遍的意义。任何微观复杂粒子之间的碰撞, 随着碰撞能量的增加，碰撞涉及的粒子数或自由度数目也会相应的增加, 都在不同形式上存在上述过程及其相应的特点。

### 6.1.4　处理碰撞问题的任务

量子力学处理碰撞问题的任务, 以原子核物理学为例, 就是从多体 Schroedinger 方程出发, 计算从势场散射，经直接反应和中间过程反应，到形成复合系统的各种截面。这是一个非常复杂的量子力学多体问题。在本章我们只限于势场散射理论的详细介绍和直接反应理论的简介, 详细全面的了解, 应参阅有关原子碰撞和原子核反应专著[3]。

## 6.2　直接反应和 Lippmann-Schwinger 方程

### 6.2.1　碰撞问题的描述：反应道 – 内部运动与相对运动的联合描述

考虑二体碰撞过程 (如图 6-2)，即一个入射粒子 (炮弹)a 与一个靶粒子 A 相碰撞，碰撞后观测到类弹粒子 b 和类靶粒子 B

$$\mathrm{a}+\mathrm{A}\rightarrow\mathrm{b}+\mathrm{B}$$

入射粒子 (炮弹)a 与靶粒子 A 相碰撞的渐近量子态称为入射道，碰撞后出射的类弹粒子 b 和类靶粒子 B 的渐近量子态称为出射道, 从入射道变为出射道的组合 $\mathrm{a}+\mathrm{A}\rightarrow\mathrm{b}+\mathrm{B}$ 称为反应道。

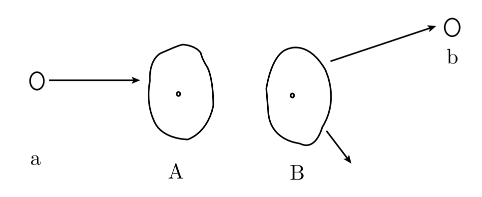



图 6-2　二体碰撞过程示意图

碰撞系统渐近的 Hamiton 量可以写成

$$\begin{aligned}\hat{H}&=H_{\alpha_1}+H_{\alpha_2}+V_\alpha(\alpha_1\alpha_2)+T_\alpha=H_{\beta_1}+H_{\beta_2}+V_\beta(\beta_1\beta_2)+T_\beta\\&=H_\alpha+V_\alpha+T_\alpha\qquad\qquad\qquad\;\;=H_\beta+V_\beta+T_\beta\end{aligned}\tag{6-1}$$

$$T_\alpha=\frac{-\hbar^2}{2\mu_\alpha}\vec{\nabla}^2_{r_\alpha}\qquad\qquad T_\beta=\frac{-\hbar^2}{2\mu_\beta}\vec{\nabla}^2_{r_\beta}\tag{6-2}$$

式中, $\mu_\alpha$ 为 a + A 的折合质量, $\mu_\beta$ 为 b + B 的折合质量, $H_\alpha$ 描述内部运动, $T_\alpha$ 描述相对运动, $V_\alpha$ 描述 a-A 之间相互作用。

入射粒子和靶粒子的渐近量子数称为入射道量子数 $\alpha = (\alpha_1\alpha_2)$, 出射粒子和类靶粒子的渐近量子数称为出射道量子数 $\beta = (\beta_1\beta_2)$, 它们定量地描述了入射道和出射道的渐近量子态。因而定量地说, 从入射道 $\alpha$ 向出射道 $\beta$ 的转变称为反应道 $(\alpha \to \beta)$, 它描述了碰撞中碰撞系统的渐近量子态的变化[3,4]。

### 6.2.2 Lippmann-Schwinger 方程

Lippmann-Schwinger 方程是包含边界条件的、散射或碰撞问题的 Schroedinger 方程的解的积分形式[3,4]。

相应于入射道的 Schroedinger 方程为

$$(E - H_\alpha - T_\alpha)\psi = V_\alpha\psi \tag{6-3}$$

其形式解为

$$\psi = \frac{1}{E - H_\alpha - T_\alpha} V_\alpha\psi \tag{6-4}$$

相应的齐次方程 $(V_\alpha = 0)$ 为

$$(E - H_\alpha - T_\alpha)\phi_\alpha = 0 \tag{6-5}$$

齐次方程的解在坐标表象为

$$\langle \vec{r}_\alpha | \phi_\alpha \rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{K}_\alpha\cdot\vec{r}_\alpha}\phi(\zeta_\alpha) \tag{6-6}$$

它包含相对运动平面波解和内部运动结合态解

$$\begin{aligned} &T_\alpha \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{K}_\alpha\cdot\vec{r}_\alpha} = \frac{\hbar^2 K_\alpha^2}{2\mu_\alpha}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{K}_\alpha\cdot\vec{r}_\alpha} = E_\alpha \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{K}_\alpha\cdot\vec{r}_\alpha} \\ &H_\alpha(\zeta_\alpha)\phi_\alpha(\zeta_\alpha) = \varepsilon_\alpha\phi_\alpha(\zeta_\alpha), \end{aligned} \quad E = E_\alpha + \varepsilon_\alpha \tag{6-7}$$

非齐次方程的一般解应该是齐次方程的通解加非齐次方程的特解, 然后用边界条件确定通解的系数。考虑入射条件后, 散射或碰撞问题的解为

$$\psi_\alpha = \phi_\alpha + \frac{1}{E - H_\alpha - T_\alpha} V_\alpha\psi_\alpha \tag{6-8}$$

式 (6-8) 表示的解已在齐次方程的通解中考虑了散射或碰撞问题中的入射条件，即渐近地存在着入射的平面波 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{K}_\alpha\cdot\vec{r}_\alpha}$ 和内部量子态 $\phi_\alpha(\zeta_\alpha)$，因此通解只取一项 $\varPhi_\alpha$。但还没有考虑散射波或出射波的边界条件。如果要求在无限远处还存在着向外的

散射或出射的球面波，则可得到完全满足散射的边界条件 (包括入射条件和散射出射条件) 的一个特解

$$\Psi_{\alpha}^{(+)} = \Phi_{\alpha} + \frac{1}{E - H_{\alpha} - T_{\alpha} + \mathrm{i}\varepsilon} V_{\alpha} \Psi_{\alpha}^{(+)} \tag{6-9}$$

下面会看到，包含 $\mathrm{i}\varepsilon$ 的 Green 函数在 $r_{\alpha} \to \infty$ 时导致向外的球面波。上述方程称为 Lippmann-Schwinger 方程，是用 Green 算子写出的一个积分方程，是散射或碰撞问题的 Schroedinger 方程的一个特解，已把散射问题的入射条件和散射出射条件等边界条件放到积分方程的解中。因此，Lippmann-Schwinger 方程是考虑了边界条件的散射或碰撞问题的 Schroedinger 方程的积分形式的解。

现来计算 Green 函数 $G = \dfrac{1}{E - H_{\alpha} - T_{\alpha} + \mathrm{i}\varepsilon}$ 在坐标空间的矩阵元 $G_{\alpha\alpha'}(\vec{r}, \vec{r}')$。利用

$$H_{\alpha}|\phi_{\alpha}\rangle = \varepsilon_{\alpha}|\phi_{\alpha}\rangle, \quad T_{\alpha}|K_{\alpha}\rangle = \frac{\hbar^2 K_{\alpha}^2}{2\mu_{\alpha}}|K_{\alpha}\rangle \tag{6-10a}$$

$$\langle\phi_{\alpha}|\phi_{\alpha}'\rangle = \delta_{\alpha\alpha'} \quad , \quad \langle K|K'\rangle = (2\pi)^3\delta(K - K') \tag{6-10b}$$

$$\langle r|K\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{K}.\vec{r}} \quad , \quad (2\pi)^{-3}\int |\vec{K}\rangle\langle\vec{K}|\mathrm{d}\vec{K} = I \tag{6-10c}$$

$$|\vec{r}'\rangle = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad , \quad \int |\vec{r}'\rangle\langle\vec{r}'\mathrm{d}\vec{r}'| = I \tag{6-10d}$$

可得

$$\begin{aligned}
G_{\alpha\alpha'}(\vec{r}, \vec{r}') &= \langle\vec{r}\phi_{\alpha}|\frac{1}{E - H_{\alpha} - T_{\alpha} + \mathrm{i}\varepsilon}|\vec{r}'\phi_{\alpha'}\rangle \\
=&\langle\vec{r}|\frac{1}{E_{\alpha} - T_{\alpha} + \mathrm{i}\varepsilon}|\vec{r}'\rangle\delta_{\alpha\alpha'} \\
=&\delta_{\alpha\alpha'}(2\pi)^{-6}\iint \langle\vec{r}|K\rangle\langle K|\frac{1}{E_{\alpha} - T_{\alpha} + \mathrm{i}\varepsilon}|K'\rangle\langle K'|r'\rangle\mathrm{d}\vec{K}\mathrm{d}\vec{K}' \\
=&\delta_{\alpha\alpha'}\frac{2\mu_{\alpha}}{\hbar^2}(2\pi)^{-3}\iint \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{K}\cdot\vec{r} - \mathrm{i}\vec{K}'\cdot\vec{r}'}\frac{1}{K_{\alpha}^2 - K^2 + \mathrm{i}\varepsilon}\delta(\vec{K} - \vec{K}')\mathrm{d}\vec{K}\mathrm{d}\vec{K}' \\
=&\delta_{\alpha\alpha'}\frac{2\mu_{\alpha}}{\hbar^2}(2\pi)^{-3}\frac{2\pi}{\mathrm{i}R}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}KR}K\mathrm{d}K}{[K_{\alpha} - (K - \mathrm{i}\lambda)][K_{\alpha} + (K + \mathrm{i}\lambda)]} \\
=& -\delta_{\alpha\alpha'}\frac{2\mu_{\alpha}}{\hbar^2}(2\pi)^{-3}\frac{2\pi}{\mathrm{i}R}2\pi\mathrm{i}\frac{K_{\alpha}}{2K_{\alpha}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}K_{\alpha}R}(R = |\vec{r} - \vec{r}'|) \\
=& -\delta_{\alpha\alpha'}\frac{\mu_{\alpha}}{2\pi\hbar^2}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}K_{\alpha}R}}{R} \\
=& -\delta_{\alpha\alpha'}\frac{\mu_{\alpha}}{2\pi\hbar^2}\cdot\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}K_{\alpha}|\vec{r} - \vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|}
\end{aligned} \tag{6-11a}$$

$$\xrightarrow{r\gg r'} -\delta_{\alpha\alpha'}\frac{\mu_\alpha}{2\pi\hbar^2}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}K_\alpha r}}{r}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{K}_\alpha\cdot\vec{r}'} \tag{6-11b}$$

因此，带 $\mathrm{i}\varepsilon$ 的 Green 函数渐近地产生一个向外的球面波。

### 6.2.3　跃迁振幅

从散射方程的特解 $\Psi_\alpha^{(+)}$，可以求得从 $\alpha$ 道向 $\alpha'$ 道跃迁的振幅，它正好是 $\Psi_\alpha^{(+)}$ 在 $|\vec{r}_\alpha\phi_\alpha\rangle$ 上的投影。

$$\begin{aligned}
&\langle\vec{r}_\alpha\phi_{\alpha'}|\Psi_\alpha^{(+)}\rangle\\
=&\delta_{\alpha\alpha'}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{K}_\alpha\vec{r}_\alpha}+\sum_{\alpha''}\int\vec{r}'_{\alpha'}\langle\vec{r}_\alpha\phi_{\alpha'}|\frac{1}{E-H_\alpha-T_\alpha+\mathrm{i}\varepsilon}|\vec{r}_\alpha{}'\phi_{\alpha'}\rangle\langle\phi_{\alpha'}\vec{r}'_\alpha|V_\alpha\Psi_\alpha^{(+)}\rangle\\
=&\delta_{\alpha'\alpha}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{K}_\alpha\cdot\vec{r}_\alpha}-\frac{\mu_\alpha}{2\pi\hbar^2}\int\mathrm{d}\vec{r}'_\alpha\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}K'_\alpha|\vec{r}_\alpha-\vec{r}'_\alpha|}}{|\vec{r}_\alpha-\vec{r}'_\alpha|}\langle\vec{r}'_\alpha\phi_{\alpha'}|V_\alpha\Psi_\alpha^{(+)}\rangle
\end{aligned} \tag{6-12a}$$

$$\xrightarrow{r_\alpha\to\infty}\delta_{\alpha'\alpha}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{K}_\alpha\cdot\vec{r}_\alpha}-\frac{\mu_\alpha}{2\pi\hbar^2}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}K'_\alpha r_\alpha}}{r_\alpha}\int\mathrm{d}\vec{r}'_\alpha\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{K}'_\alpha\cdot\vec{r}'_\alpha}\langle\vec{r}'_\alpha\phi_{\alpha'}|V_\alpha\Psi_\alpha\rangle \tag{6-12b}$$

$$K'_\alpha=\sqrt{\frac{2\mu_\alpha E_{\alpha'}}{\hbar^2}}\quad,\qquad E_{\alpha'}=E-\varepsilon'_\alpha$$

跃迁振幅为向外球面波的系数。

$$\begin{aligned}
f_{\alpha'\alpha}&=\frac{\mu_{\alpha'}}{2\pi\hbar^2}A_{\alpha'\alpha}\\
A_{\alpha'\alpha}&=\int\mathrm{d}\vec{r}'_\alpha\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{K}'_\alpha\cdot\vec{r}'_\alpha}\langle\vec{r}'_\alpha\phi_{\alpha'}|V_\alpha\Psi_\alpha^{(+)}\rangle\\
&=\langle\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\vec{K}'_{\alpha'}\vec{r}_\alpha}\phi_{\alpha'}|V_\alpha|\Psi_\alpha^{(+)}\rangle=\langle\Phi_{\alpha'}|V_\alpha|\Psi_\alpha^{(+)}\rangle
\end{aligned} \tag{6-13a}$$

$$\Phi_{\alpha'}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{K}_{\alpha'}\cdot\vec{r}_\alpha}\phi_{\alpha'} \tag{6-13b}$$

如果对 $\Psi_\alpha^{(+)}$ 取 0 级近似 $\Psi_\alpha^{(+)}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{K}'_\alpha\cdot\vec{r}_\alpha}\phi_\alpha$，则有

$$A^{(0)}_{\alpha'\alpha}=\int\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{K}^{\cdot}_{\alpha'}\vec{r}_\alpha}\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\vec{K}_\alpha\cdot\vec{r}_\alpha}\mathrm{d}\vec{r}_\alpha\langle\phi_{\alpha'}|V_\alpha(\vec{r}_\alpha)|\phi_\alpha\rangle_\zeta \tag{6-14}$$

就是 Born 近似下的跃迁振幅。

### 6.2.4　直接反应过程的跃迁振幅

上述公式只适合于描述弹性碰撞和非弹性碰撞，对于改变内部结构的反应过程，即 $\alpha\to\beta(\neq\alpha)$ 的跃迁需要另行考虑。反应振幅的计算如下。

改写 Lippmann-Schwinger 方程，以适合反应过程。

$$\Psi_\alpha^{(+)}=\Phi_\alpha+\frac{1}{E-H_\alpha-T_\alpha+\mathrm{i}\varepsilon}V_\alpha\Psi_\alpha^{(+)}$$

$$
\begin{aligned}
&= \varPhi_\alpha + \frac{1}{E-H_\beta-T_\beta+\mathrm{i}\varepsilon}[V_\alpha+(V_\beta-V_\alpha)\frac{1}{E-H_\alpha-T_\alpha+\mathrm{i}\varepsilon}V_\alpha]\varPsi_\alpha^{(+)} \\
&= \varPhi_\alpha + \frac{1}{E-H_\beta-T_\beta+\mathrm{i}\varepsilon}[V_\alpha\varPsi_\alpha^{(+)}+(V_\beta-V_\alpha)(\varPsi_\alpha^{(+)}-\varPhi_\alpha)] \\
&= [1-\frac{1}{E-H_\beta-T_\beta+\mathrm{i}\varepsilon}(V_\beta-V_\alpha)]\varPhi_\alpha+\frac{1}{E-H_\beta-T_\beta+\mathrm{i}\varepsilon}V_\beta\varPsi_\alpha^{(+)})] \\
&= \frac{i\varepsilon}{E-H_\beta-T_\beta+\mathrm{i}\varepsilon}\varPhi_\alpha+\frac{1}{E-H_\beta-T_\beta+\mathrm{i}\varepsilon}V_\beta\varPsi_\alpha^{(+)} \\
&= \frac{1}{E-H_\beta-T_\beta+\mathrm{i}\varepsilon}V_\beta\varPsi_\alpha^{(+)} \quad (\varepsilon\to 0,\beta\neq\alpha)
\end{aligned}
\tag{6-15}
$$

这表示，在反应过程中，Schroedinger 方程的解只有向外的 $\beta$- 道的球面波，而 $\alpha$ 入射道的波已经消失而不复在出射道中出现。同样, 可求得式 (6-15) 中出射 $\beta$- 道的 Green 函数 $\dfrac{1}{E-H_\beta-T_\beta+\mathrm{i}\varepsilon}$ 的表达式，计算如下。

$$
\begin{aligned}
&\langle\vec{r}_\beta\phi_\beta|\frac{1}{E-H_\beta-T_\beta+\mathrm{i}\varepsilon}|V_\beta\varPsi_\alpha^{(+)}\rangle \\
&= -\frac{\mu_\beta}{2\pi\hbar^2}\int\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}K_\beta|\vec{r}_\beta-\vec{r}\,'_\beta|}}{|\vec{r}_\beta-\vec{r}\,'_\beta|}\mathrm{d}\vec{r}\,'_\beta\langle\vec{r}\,'_\beta\phi_\beta|V_\beta\varPsi_\alpha^{(+)}\rangle \\
&\xrightarrow{r\to\infty} -\frac{\mu_\beta}{2\pi\hbar^2}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}K_\beta r_\beta}}{r_\beta}\int\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{K}_\beta\vec{r}\,'_\beta}\mathrm{d}\vec{r}\,'_\beta\langle\vec{r}\,'_\beta\phi_\beta|V_\beta\varPsi_\alpha^{(+)}\rangle
\end{aligned}
\tag{6-16}
$$

$$
\begin{aligned}
f_{\beta\alpha} &= \frac{\mu_\beta}{2\pi\hbar^2}A_{\beta\alpha} \\
A_{\beta\alpha} &= \int\mathrm{e}^{-\mathrm{i}K_\beta r'_\beta}\mathrm{d}\vec{r}\,'_\beta\langle\vec{r}\,'_\beta\phi_\beta|V_\beta\varPsi_\alpha^{(+)}\rangle = \langle\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{K}_\beta\cdot\vec{r}_\beta}\phi_\beta|V_\beta|\varPsi_\alpha^{(+)}\rangle
\end{aligned}
\tag{6-17}
$$

当取近似 $\varPsi_\alpha^{(+)}\approx\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{K}_\alpha\cdot\vec{r}_\alpha}\varPhi_\alpha$ 时, 得到 Born 近似的结果。

这样，我们从碰撞问题的 Schroedinger 方程的积分解 (Lippmann-Schwinger 方程) 出发，通过 Green 函数的具体计算，给出了散射过程和直接反应过程的跃迁振幅的公式。只要求得 $\varPhi_\alpha,\varPhi_\beta$ 和 $\varPsi_\alpha^{(+)},A_{\alpha\alpha'}(A_{\beta\alpha})$ 的计算就归结一个多重积分的计算。本节的 $\varPhi_\alpha,\varPhi_\beta$ 中相对运动波函数是平面波，更进一步应考虑在光学势场中的相对运动的扭曲波以及相应的扭曲波 Born 近似 (DWBA)。

Putherforad 散射: 由于 Putherforad 散射是势场散射, 粒子内部自由度冻结, 在 Born 近似下有

$$
\phi_\alpha=\phi_{\alpha'}=1, V_\alpha=\frac{\mathrm{e}^2}{r} \tag{6-18a}
$$

势场散射振幅为

$$
f_{\alpha\alpha}(\theta)=-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}A_{\alpha\alpha}
$$

$$
\begin{aligned}
A_{\alpha\alpha} &= \langle \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{K}\cdot r}\phi'_\alpha|V_\alpha|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{K}\cdot\vec{r}}\phi'_\alpha\rangle = \int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\vec{K}'-\vec{K})\cdot\vec{r}}\frac{\mathrm{e}^2}{r}\mathrm{d}\vec{r} \\
&= \int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\Delta\vec{K}\cdot\vec{r}}\frac{\mathrm{e}^2}{r}\mathrm{d}\vec{r} = 2\pi\int_0^\infty r^2\mathrm{d}r\frac{\mathrm{e}^2}{r}\int_\pi^0 \mathrm{d}\cos\theta \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\Delta K r\cos\theta} \\
&= 4\pi\mathrm{e}^2\int_0^\infty \sin\Delta K r\frac{\mathrm{d}r}{\Delta K} = \frac{4\pi\mathrm{e}^2}{(\Delta K)^2} = \frac{\pi}{k^2}\frac{\mathrm{e}^2}{\sin^2\dfrac{\theta}{2}}
\end{aligned} \tag{6-18b}
$$

$$
\Delta K = \sqrt{(\vec{K}'-\vec{K})^2} = 2K\sin\frac{\theta}{2} \tag{6-18c}
$$

$$
f_{\alpha\alpha}(\theta) = \frac{\mu\mathrm{e}^2}{2\hbar^2k^2}\frac{1}{\sin^2\dfrac{\theta}{2}} = \frac{\mathrm{e}^2}{2\mu V^2\sin^2\dfrac{\theta}{2}} \tag{6-18d}
$$

$\theta$是$\vec{K}$和$\vec{K}'$的夹角。截面为

$$
\sigma(\theta) = (f_{\alpha\alpha}(\theta))^2 = \frac{\mathrm{e}^4}{4\mu^2V^4\sin^4\dfrac{\theta}{2}} \tag{6-19}
$$

即为著名的 Rutherford 公式。

## 6.3 光学模型和势场散射

### 6.3.1 光学模型

前面从质子与原子核碰撞过程的光学类比中提出了光学模型的概念。光学模型的提出还有另一个理由。在第 3 ～ 5 章中看到，平均场理论在原子结构、原子核结构和固体能带结构问题的应用中相当成功，没有理由认为它在原子和原子核碰撞问题上会完全失去效力。而光学模型正是把平均场理论从负能结合态问题 (结构问题) 推广到正能连续谱问题 (碰撞、散射和反应问题) 的一个成功的尝试。研究表明，光学模型在复杂粒子低能碰撞问题的应用中相当成功，基于扭曲波 Born 近似 (DWBA) 对原子核弹性散射和直接反应的成功应用就是一个很好的例子[3,5,6]。

1. 结构的平均场理论和碰撞的平均场理论的共同点

结构问题的平均场理论和碰撞问题的平均场理论的共同点是, 量子多体系统中一个粒子受其余粒子的相互作用的叠加和平均, 作为零级近似可以用单体平均场描述，而它的作用是导致粒子在平均场中的独立粒子运动。

2. 结构的平均场理论和碰撞的平均场理论的不同点

在结构问题上，由于是负能态间断能谱, Pauli 原理的限制较强，平均场以外的剩余作用较弱，平均场概念和独立粒子近似在更大的程度上成立；而在反应问题

上，由于是正能态连续能谱, Pauli 原理的限制较弱，平均场以外的剩余作用的影响相对说来较强，不同反应道之间的耦合变得十分重要。在壳层模型中，人们考虑的是原子核的稳定的壳层结构，稳定能级的能量是实数, 所对应的平均场是实的。在反应中，如果计及剩余作用引起的所有的反应道之间的耦合，平均场仍然是实的；但如果消去次要的反应道而只保留重要的反应道，作为被消去的次要反应道的物理效应的补偿，必须引进虚的势场去描述粒子从被保留的反应道向被消去的反应道的衰变。

3. 复数势场导致吸收

设粒子在复势

$$U(r) = U_0(r) + \mathrm{i}W(r) \tag{6-20}$$

中运动，满足时间有关的 Schroedinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U_0 + \mathrm{i}W\right)\psi \tag{6-21}$$

由方程 (6-21) 及其复共轭，可得连续性方程

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \mathrm{div}\vec{j} = \frac{2}{\hbar}\psi^* W\psi = \frac{2W}{\hbar}\rho \tag{6-22}$$

式中几率密度 $\rho$ 和几率流密度 $\vec{j}$ 定义为

$$\rho = \psi^*\psi, \quad \vec{j} = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}(\psi\vec{\nabla}\psi^* - \psi^*\vec{\nabla}\psi) \tag{6-23}$$

对于定态有 $\dfrac{\partial\rho}{\partial t} = 0$ ，因而

$$\mathrm{div}\vec{j} = \frac{2W}{\hbar}\rho \tag{6-24}$$

式中, 右边表示源 ($W > 0$) 或漏 ($W < 0$) 的项目，$W$ 为负表示入射粒子流可以消失。吸收截面等于在某一球面上总的向内流量除以入射粒子流密度

$$\begin{aligned}\sigma_A &= -\oiint_\sigma \vec{j}\cdot\mathrm{d}\vec{\sigma}/v = -\iiint \mathrm{div}\vec{j}/v\mathrm{d}V \\ &= \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\frac{\mathrm{i}\hbar}{2mv}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial r} - \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial r}\right)r^2\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi\end{aligned} \tag{6-25}$$

式 (6-25) 的计算中用到 $r\to\infty$ 时的球面上的积分和 $\vec{j}\cdot\mathrm{d}\vec{\sigma} = j_r r^2\sin\theta\cdot\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi$, 对于沿 z- 轴的入射平面波，其散射波的渐近式为 (6.3.2 小节)

$$\psi = -\sum_{l=o}^{\infty}\frac{(2l+1)}{2\mathrm{i}kr}P_l(\cos\theta)(s_l\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}) \tag{6-26}$$

$s_l$ 表示散射 $l$ 分波的振幅, 当散射 $l$ 分波被部分吸收时, $|s_l|^2 < 1$。把式 (6-26) 代入 $\sigma_A$ 的表达式，得

$$\sigma_A = \frac{\pi}{k^2}\sum_l(2l+1)(1-|s_l|^2) \tag{6-27}$$

若势场为实，$W = 0 \to |s_l|^2 = 1 \to \sigma_A = 0$, 吸收截面为零, 为弹性散射, 每个散射 $l$ 分波都无损耗。若势场虚部为负，散射 $l$ 分波被部分吸收, $|s_l|^2 < 1 \to \sigma_A \neq 0$。

综上所述，光学模型的提出有两个根据：一是粒子碰撞过程与光学过程的类比；二是结合态平均场理论向碰撞问题的推广。光学模型对弹性散射进行了详细的描述，而把弹性散射以外的复杂过程当作吸收过程用势场的虚部加以笼统描述。光学模型在核反应理论中所起的作用有些像壳层模型在核结构理论中所起的作用，二者都基于平均势场概念, 都是相应的多体理论进一步改进的基础和出发点。光学模型虽然是在原子核反应理论中提出的, 但其基本概念对其他量子多体碰撞问题也有参考价值。

### 6.3.2 微观光学势与唯象光学势

6.3.1 小节讲述了提出光学模型的两个根据：碰撞过程的光学类比，平均场理论的有效性和推广。本小节转向光学模型本身的问题。光学模型的基本问题是确定光学势和计算粒子在光学势中的散射与吸收。本小节讨论光学势的确定问题，6.3.3 小节讲述光学模型的求解问题。

1. 光学模型的基本问题

光学模型的基本问题包括①确定光学势；②计算粒子在光学势的运动 (散射与吸收)。

前面讲到，光学势的提出是基于平均场概念。入射粒子与靶核中众多核子发生相互作用, 这些核内的核子对入射粒子的相互作用，经过对核内核子的状态的平均，对每个核子的贡献叠加之后，将产生一个总的单体平均势场。在这个平均势场以外，还存在剩余的二体相互作用引起的涨落。在入射粒子能量不太高 (每个核子 20MeV 以下) 的情况下，由于激发能的限制, 相互碰撞的两个原子核的内禀激发可资利用的组态不多，加之 Pauli 原理的限制，剩余作用引起的涨落还不会达到从根本上瓦解平均势场和独立粒子运动的地步。因此，平均场仍可以作为处理核反应问题的出发点，而把剩余作用当作微扰处理。这就是基于平均场概念对光学模型所作用的微观分析。从这种分析可以看出，光学势的确定，应当从多体散射理论出发，运用平均场的方法，从多体相互作用中提取出核反应中的平均势场 —— 光学势。这样确定的光学势叫做微观光学势。目前，推导微观光学势有三个主要的途径：①多体散射途径；②多体 Green 函数途径；③路径积分途径。下面分别予以简要介绍。

2. 微观光学势

作为平均场的微观光学势应当由量子多体理论推导出来, 现介绍三种主要途径。

1) 多体散射途径

多体散射途径的基本想法是从多体 Schroedinger 方程出发，运用投射算子，投射出弹性道的方程，消去其余的反应道。设系统的 Hamilton 量为

$$\hat{H} = \hat{H}_1(\xi_1) + \hat{H}_2(\xi_2) + \hat{T}(\vec{\nabla}_R) + V(\vec{R}, \xi_1, \xi_2) \tag{6-28}$$

设两个碰撞核的内禀波函数 $\psi_i(\xi_1), \varphi_i(\xi_2)$ 满足

$$\begin{aligned}(\hat{H}_1(\xi_1) - \varepsilon_{1i})\psi_i(\xi_1) = 0, \langle\psi_i|\psi_j\rangle = \delta_{ij} \\ (\hat{H}_2(\xi_2) - \varepsilon_{2i})\varphi_i(\xi_2) = 0, \langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = \delta_{ij}\end{aligned} \tag{6-29}$$

则系统总的散射波函数 $\Psi^{(+)}$ 可写成

$$\Psi^{(+)}(R, \xi_1, \xi_2) = \sum_{kl} \chi_{kl}(R)\psi_k(\xi_1)\varphi_l(\xi_2) \tag{6-30}$$

式中，$\chi_{00}$ 为弹性道相对运动波函数，对应的两个碰撞核处于基态 $|\psi_0\varphi_0\rangle$。

对系统总体的 Schroedinger 方程

$$(\hat{H} - E)\Psi^{(+)} = 0 \tag{6-31}$$

引进向两个碰撞核基态 $|\psi_0\varphi_0\rangle$ 投影的算子 $\hat{P}$(向弹性道子空间的投射算子) 和与之正交互补的投影算子 $\hat{Q}$(向弹性道以外的道空间的投射算子)

$$\hat{P} = |\psi_0\varphi_0\rangle\langle\varphi_0\psi_0| \tag{6-32}$$

$$\hat{Q} = \hat{I} - \hat{P} = \sum_{i,j\neq 0} |\psi_i\varphi_j\rangle\langle\varphi_j\psi_i| \tag{6-33}$$

由本征函数的正交性, 可证

$$\hat{P}^2 = \hat{P}, \hat{Q}^2 = \hat{Q}, \hat{P}\hat{Q} = \hat{Q}\hat{P} = 0 \tag{6-34}$$

对波函数和运动方程可进行相应的分解

$$\Psi^{(+)} = (\hat{P} + \hat{Q})\Psi^{(+)} = \hat{P}\Psi^{(+)} + \hat{Q}\Psi^{(+)} \tag{6-35a}$$

$$(\hat{H} - E)(\hat{P}\Psi^{(+)} + \hat{Q}\Psi^{(+)}) = 0 \tag{6-35b}$$

$$(\hat{P}\hat{H}\hat{P} - E)(\hat{P}\Psi^{(+)}) = -\hat{P}\hat{H}\hat{Q}(\hat{Q}\Psi^{(+)}) \tag{6-35c}$$

$$(\hat{Q}\hat{H}\hat{Q} - E)(\hat{Q}\Psi^{(+)}) = -\hat{Q}\hat{H}\hat{P}(\hat{P}\Psi^{(+)}) \tag{6-35d}$$

在耦合方程 (6-35) 中，消去弹性道以外的解 $\hat{Q}\Psi^{(+)}$，可得到弹性道的相对运动的方程。

由

$$\hat{Q}\Psi^{(+)} = -\frac{1}{E-\hat{Q}\hat{H}\hat{Q}+\mathrm{i}\varepsilon}\hat{Q}\hat{H}\hat{P}(\hat{P}\Psi^{(+)}) \tag{6-36}$$

得

$$(\hat{P}\hat{H}\hat{P}+\hat{P}\hat{H}\hat{Q}\frac{1}{E-\hat{Q}\hat{H}\hat{Q}+\mathrm{i}\varepsilon}\hat{Q}\hat{H}\hat{P}-E)(\hat{P}\Psi^{(+)})=0 \tag{6-37}$$

因

$$(\hat{P}\hat{H}\hat{P})(P\Psi^{(+)}) = \hat{P}(\hat{T}+\varepsilon_{10}+\varepsilon_{20}+\langle\psi_0\varphi_0|\hat{V}|\psi_0\varphi_0\rangle)(\hat{P}\Psi^{(+)}) \tag{6-38}$$

$$\hat{P}\hat{H}\hat{Q} = \hat{P}(\hat{H}_1(\xi_1)+\hat{H}_2(\xi_2)+\hat{V}(R,\xi_1,\xi_2)+\hat{T}(R))\hat{Q} = \hat{P}\hat{V}\hat{Q}, \hat{Q}\hat{H}\hat{P} = \hat{Q}\hat{V}\hat{P}$$

故

$$\hat{P}[\hat{T}+\langle\psi_0\varphi_0|V|\psi_0\varphi_0\rangle+\langle\psi_0\varphi_0|\hat{V}\hat{Q}\frac{1}{E-\hat{Q}\hat{H}\hat{Q}+\mathrm{i}\varepsilon}\hat{Q}\hat{V}|\psi_0\varphi_0\rangle-E_{00}]\hat{P}\Psi^{(+)}=0 \tag{6-39a}$$

式中，

$$E_{00} = E-\varepsilon_{10}-\varepsilon_{20} \tag{6-39b}$$

用 $\langle\psi_0\varphi_0|$ 乘式 (6-39)，并注意到

$$\hat{P}\Psi^{(+)} = |\psi_0\varphi_0\rangle\chi_{00} \tag{6-40a}$$

得到相对运动波函数 $\chi_{00}(R)$ 满足的运动方程

$$(\hat{T}(R)+\hat{U}_{op}(R)-E_{00})\chi_{00}(R)=0 \tag{6-40b}$$

其中微观光学势

$$\begin{aligned}\hat{U}_{op}(R) &= \langle\psi_0\varphi_0|\hat{V}(R,\xi)|\psi_0\varphi_0\rangle_{(\xi)}+\langle\psi_0\varphi_0|\hat{V}\hat{Q}\frac{1}{E-\hat{Q}\hat{H}\hat{Q}+\mathrm{i}\varepsilon}\hat{Q}\hat{V}|\psi_0\varphi_0\rangle_{(\xi)}\\ &= \hat{U}_F+\Delta\hat{U}\end{aligned} \tag{6-40c}$$

$\langle|\hat{O}|\rangle_{(\xi)}$ 表示对原子核内禀状态平均，$\hat{U}_F$ 是光滑的双折叠势，$\Delta\hat{U}$ 是能量有关的、非 Hermite 的复势，是非弹性道对弹性道的贡献，与两个碰撞核的内部激发的共振结构有关。在两个核基态波函数 $\psi_0$ 和 $\varphi_0$ 的平均场独立粒子近似下, 双折叠势可进一步写成

$$\hat{U}_F = \int \mathrm{d}\vec{r}_1\mathrm{d}\vec{r}_2\rho_1(\vec{r}_1)\rho_2(\vec{r}_2)V(\vec{r}_{12}) \quad (\vec{r}_{12}=\vec{R}+\vec{r}_2-\vec{r}_1) \tag{6-41a}$$

$\rho(\vec{r}_i)$ 是第 $i$ 个核内核子的密度分布，如定义第一个核内的核子感受到的第二个核的光学势 $U_{n2}$ 为

$$U_{n2}(\vec{R}-\vec{r}_1) = \int \mathrm{d}\vec{r}_2\rho_2(\vec{r}_2)V(\vec{r}_{12}) \tag{6-41b}$$

则 $U_F$ 可改写成单折叠势的形式

$$\hat{U}_F(\vec{R}) = \int \mathrm{d}\vec{r}_1 \rho_1(\vec{r}_1) U_{n2}(\vec{R} - \vec{r}_1) \tag{6-41c}$$

近年来的计算表明，对于 $E/A\sim10\text{Mev}$, $A \geqslant 10$ 的核，用核反应的 $G$-矩阵代替核子–核子裸相互作用 $v(ij)$ 所作的双折叠光学势的计算是相当成功的。从 $\hat{U}_{op}$ 的表达式可知，用折叠势近似 $\hat{U}_F$ 表示光学势，略去了原子核的内部激发对光学势的贡献。

2) 多体 Green 函数途径

多体 Green 函数途径是用单粒子 Green 函数的积分方程中的质量算子的 Fourier 分量去定义单粒子光学势

$$\begin{aligned} G(x,x') &= G_0(x,x') - \int G_0(x,x'')M(x'',x''')G_0(x''',x')\mathrm{d}x''\mathrm{d}x''' \\ U_{op}(\vec{r},\vec{r}',E) &\equiv M(\vec{r},\vec{r}',E) = \int \mathrm{d}(t-t')\mathrm{e}^{\mathrm{i}E(t-t')/\hbar}M(x,x') \end{aligned} \tag{6-42}$$

其中质量算子 $M(x,x')$ 可以从多体 Green 函数的方程中计算。对于结合态问题，在独立粒子近似下，质量算子就是通常的 Hartree-Fock 自洽场。这一途径的优点是在二次量子化表象中工作，便于考虑 Pauli 原理，便于分析核结构对于光学势的影响，便于讨论光学势的解析性质。

3) 路径积分途径

近年有人用路径积分方法研究重离子碰撞中的光学势，其基本想法是用路径积分的形式写出光学势产生的散射振幅和微观二体相互作用给出的散射振幅，把二者加以比较，即可得到光学势的微观表达式，这方面的研究尚不成熟。

近年来，核子与原子核相互作用的微观光学势的研究取得了很大的进展。无可调参数的微观光学势对实验数据的拟合的精度已达到唯象光学势的水平。

应当指出，人们常常把微观光学势区分为广义光学势与光学模型势，后者是前者对一定能量区域的平均。由于实验中入射粒子的能量有一分布宽度，光学模型所分析的实验数据实际上是对入射粒子能量分布的平均，原子核的内部激发的尖锐共振能级对光学势的贡献经过能量平均后而被平滑掉, 所以光学模型势只给出截面随能量变化的平滑部分。

### 3. 唯象光学势

在光学模型发展的早期，由于计算条件的限制，微观光学势的研究还停留于形式理论的阶段，而唯象光学势的研究则发展很快。从核力的性质和核结构的知识以及微观光学势的定性和半定量的结论，人们可以获得光学势的某些知识。由于核力是短程力，光学势强度的分布应紧密地与原子核密度分布相联系。从核力和原子核

壳层结构理论知道，光学势是同位旋有关的，还应包含自旋–轨道相互作用。从微观光学势的形式理论知道，光学势是能量有关的、非定域的，除了描述散射的实部还应包含表示吸收的虚数部分。依据这些半定量的知识，人们首先写出光学势的某种函数形式，其中包含若干可调参数，通过与实验数据的最佳拟合去确定这些参数。这样确定的光学势称为唯象光学势。

如果假定原子核是球对称的，则核子与原子核的平均作用势 (光学势) 一般可写成

$$U(\vec{r}) = V_c - Vf(x_0) + \left(\frac{\hbar}{\mu_\pi c}\right)^2 V_{sl}(\vec{s}\cdot\vec{l})\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}f(x_{sl}) + \mathrm{i}\left[Wf(x_W) - 4W_D\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dx_D}}f(x_D)\right] \tag{6-43}$$

其中 $V_c$ 为 Coulomb 势，通常假定原子核具有均匀电荷分布，则

$$V_c(r) = \begin{cases} \dfrac{z_1 z_2 e^2}{2R_c}[3-(\dfrac{r}{R_c})^2], & r \leqslant R_c \\ \dfrac{z_1 z_2 e^2}{r}, & r > R_c \end{cases} \tag{6-44}$$

$R_c$ 是原子核的电荷分布半径，势场的形状因子 $f(x_i)$ 通常取 Woods-Saxon 型 (图 6-3)，它与原子核内核子密度分布一致，

$$f(x_i) = 1/(1+\mathrm{e}^{x_i}), \quad x_i = (r - r_i A^{1/3})/a_i \tag{6-45}$$

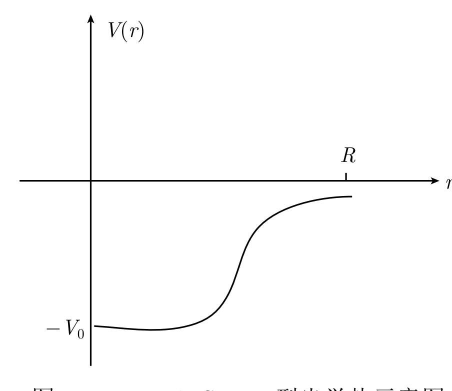


图 6-3 Woods-Saxon 型光学势示意图

势场的实数部分的第二项代表中心力，第三项是自旋–轨道力，由于包含 $f(x_i)$ 的梯度，只在核子密度变化剧烈的表面区域有较强的作用。虚部第一项表示体吸收，第二项表示面吸收。作用强度 $V$，$V_{sl}$，$W$，$W_D$ 以及作用半径参数 $r_i$ 和表面厚度 $a_i$ 是靶核质量数 $A_T$，电荷数 $Z_T$ 以及入射粒子类型及其能量的函数。$\dfrac{\hbar}{\mu_\pi c}$ 是 π 介子的 Compton 波长。对于质子和中子, Bechitte 和 Greenless 给出下列光学势参数。

1) 质子

$$V = 54 - 0.32E + 24\frac{N-Z}{A} + 0.4\frac{Z}{A^{1/3}}, r_0 = 1.17, a_0 = 0.75$$
$$W = 0.22E - 2.7 \text{ 或 } 0$$
$$W_D = 11.8 - 0.25E + 12\frac{N-Z}{A} \text{ 或 } \quad 0(W_D \geqslant 0)$$

$$r_W = r_D = 1.32, a_W = a_D = 0.51 + 0.7\frac{N-Z}{A}$$
$$V_{sl} = 6.2, r_{sl} = 1.01, a_{sl} = 0.75 \tag{6-46a}$$

2) 中子

$$V = 56.3 - 0.32E + 24\frac{N-Z}{A}, r_0 = 1.17, a_0 = 0.75$$
$$W = 0.22E - 1.56 \text{ 或 } 0(W \geqslant 0)$$
$$W_D = 11.8 - 0.25E - 12\frac{N-Z}{A} \text{ 或 } 0(W_D \geqslant 0)$$
$$r_W = r_D = 1.26, a_W = a_D = 0.58$$
$$V_{sl} = 6.2, r_{sl} = 1.1, a_{sl} = 0.75 \tag{6-46b}$$

上述参数中能量以 MeV 为单位，长度以 fm 为单位。上述参数的适应范围是 $E < 50\text{MeV}$，$A_T > 40$。近年来运用曲线拟合技术，唯象光学势能达到与实验数据的精确符合。

把光学势的微观理论与唯象理论结合起来使用，导致光学势的半唯象理论。近年来，折叠势模型获得成功，可望使光学模型的微观理论和唯象理论的统一变得容易。

最后应当指出，无论是微观光学势，还是唯象光学势，在拟合实验数据方面均具有不确定性。微观光学势虽然没有可调参数，但计算具有一定的误差。而唯象光学势就具有更大的不确定性，同一组实验数据，常常可以用不同的唯象势去拟合。

### 6.3.3 粒子在光学势场中的散射与吸收

6.3.2 小节讨论了光学势的确定问题，本小节讲述光学模型另一个基本问题，求解粒子在光学势中的散射与吸收。给定了光学势，求解 Schroedinger 方程，就能得到在一定边界条件下的散射解，并进而计算散射截面，吸收截面, 以及等于二者之和的总截面。本小节着重讨论截面的计算，总的思路是先求出弹性散射截面，然后利用光学定理，由弹性散射截面导出总截面，再从总截面减去弹性散射截面得到反应 (吸收) 截面。

1. 截面公式的推导

1) 无自旋–轨道耦合的情况 ($s=0$)

为了简单起见，先不考虑 Coulomb 场 (相当于中子散射)。

(1) 实数势场的情况。计算弹性散射截面，归结为求解下述散射问题：求 Schroedinger 方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 + U(\vec{r})\right]\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}) \tag{6-47a}$$

在满足下述边界条件

$$\Psi \xrightarrow{r\to\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} + \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} f(\theta) \tag{6-47b}$$

下的解。式 (6-47) 可化为

$$[\nabla^2 + k^2 - v(\vec{r})]\,\Psi(\vec{r}) = 0 \tag{6-48}$$

$$\begin{aligned} &v(\vec{r}) = \frac{2M}{\hbar}U(\vec{r}), \quad k^2 = \frac{2ME}{\hbar} \\ &\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kr\cos\theta} \\ &\Psi(\vec{r}) = \sum_l \frac{w_l(r)}{kr} P_l(\cos\theta) \end{aligned} \tag{6-49}$$

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}r^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} - \frac{\vec{L}^2}{r^2} = \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} - \frac{\hat{L}}{r^2} \tag{6-50a}$$

$$\nabla^2\,\Psi(\vec{r}) = \sum_l \left[\frac{w_l''(r)}{kr} - \frac{l(l+1)}{r^2}\frac{w_l(r)}{kr}\right] P_l(\cos\theta) \tag{6-50b}$$

从而可得分波方程

$$w_l''(r) - \left[\frac{l(l+1)}{r^2} + v(r) - k^2\right] w_l(r) = 0 \tag{6-51a}$$

边界条件变成径向渐近条件

$$\begin{aligned} &w_l(r) \xrightarrow{r\to 0} 0 \\ &w_l(r) \xrightarrow{r\to\infty} A_l \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right) \\ &\qquad = A_l\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l)} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l)}\right]/2\mathrm{i} \end{aligned} \tag{6-51b}$$

作为散射问题的 Schroedinger 方程的解, 整个波函数的边界渐近条件为

$$\Psi(\vec{r}) \xrightarrow{r\to\infty} \sum_l A_l\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l)} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l)}\right]/2\mathrm{i}kr\cdot P_l(\cos\theta) \tag{6-51c}$$

另一方面, 由设置的边界条件, 即入射的平面波加散射的球面波的渐近条件,

$$\Psi(\vec{r}) \xrightarrow{r\to\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} + \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} f(\theta) \tag{6-52a}$$

和

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} = \sum_l (2l+1)\mathrm{i}^l j_l(kr) P_l(\cos\theta) \tag{6-52b}$$

$$j_l(kr) \overset{r\to\infty}{\longrightarrow} \frac{\sin\left(kr - \dfrac{l\pi}{2}\right)}{kr} = \left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-\frac{l\pi}{2})} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(kr-\frac{l\pi}{2})}\right]/2\mathrm{i}kr \tag{6-52c}$$

问题设置的边界条件变为

$$\Psi(\vec{r}) \overset{r\to\infty}{\longrightarrow} \sum_l (2l+1)\mathrm{i}^l \left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-\frac{l\pi}{2})} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(kr-\frac{l\pi}{2})}\right]/2\mathrm{i}kr \cdot P_l(\cos\theta) + \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}f(\theta) \tag{6-53}$$

比较同一边界条件的两种表示，即边界条件 (6-51c) 和边界条件 (6-53) 中的向内球面波的系数，得到

$$A_l = (2l+1)\mathrm{i}^l\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l} \tag{6-54}$$

再由边界条件 (6-51c) 和边界条件 (6-53) 并运用条件 (6-54)，得到向外球面波的条件

$$\sum_l [A_l\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l} - (2l+1)\mathrm{i}^l]\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-\frac{l\pi}{2})}}{2\mathrm{i}kr}P_l(\cos\theta) - \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}f(\theta) = 0$$

从而求得散射振幅

$$\begin{aligned} f(\theta) &= \frac{1}{2\mathrm{i}k}\sum_l (2l+1)[\mathrm{e}^{\mathrm{i}2\delta_l} - 1]P_l(\cos\theta) \\ &= \frac{1}{k}\sum_l (2l+1)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}\sin\delta_l P_l(\cos\theta) \end{aligned} \tag{6-55}$$

微分截面

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{el}(\theta)}{\mathrm{d}\Omega} = |f(\theta)|^2 \tag{6-56}$$

总截面

$$\sigma_{el} = \int d\sigma_{el} = 2\pi\int_{-1}^{1}|f(\theta)|^2\mathrm{d}\cos\theta = \frac{4\pi}{k^2}\sum_l (2l+1)\sin^2\delta_l \tag{6-57}$$

计算式 (6-57) 时用到 $P_l(\cos\theta)$ 的正交性

$$\int_{-1}^{1} P_l(x)P_{l'}(x)\mathrm{d}x = \frac{2}{2l+1}\delta_{ll'} \tag{6-58}$$

(2) 光学定理。 反应中的总截面与向前弹性散射振幅之间存在下述关系

$$\sigma_t = \frac{4\pi}{k}\mathrm{Im}f(0) \tag{6-59}$$

光学定理是普遍的，这里暂不证明，仅用 6.3.3-1 节的结果验证这一定理。在势场散射的情况下，总截面就是弹性散射截面，因此应有 $\sigma_t = \sigma_{el}$。计算

$$\mathrm{Im}f(0) = \frac{1}{k}\sum_l (2l+1)\sin^2\delta_l P_l(1)$$

$$= \frac{1}{k}\sum_{l}(2l+1)\sin^2\delta_l \tag{6-60}$$

由式 (6-57) 知

$$\frac{4\pi}{k}\mathrm{Im}f(0) = \sigma_{el} = \sigma_t$$

故式 (6-59) 得证。

(3) 复数势场的情况。 对于复数势场，求散射振幅 $f(\theta)$ 的步骤与实数势场一样，$f(\theta)$ 仍用式 (6-55) 表示，但此时的相移 $\delta_e$ 应是复数。

$$\delta_l = \xi_c + i\eta_l \tag{6-61}$$

$$\begin{aligned} f(\theta) &= \frac{1}{2\mathrm{i}k}\sum_{l}(2l+1)[\mathrm{e}^{2\mathrm{i}(\xi_l+\mathrm{i}\eta_l)}-1]P_l(\cos\theta) \\ &= \frac{1}{2k}\sum_{l}(2l+1)[\mathrm{e}^{-2\eta_l}\sin 2\xi_l + \mathrm{i}(1-\mathrm{e}^{-2\eta_l}\cos 2\xi_l)]P_l(\cos\theta) \end{aligned} \tag{6-62}$$

由 $f(\theta)$ 及光学定理求得弹性散射截面

$$\begin{aligned} \sigma_{el} &= \int |f(\theta)|^2\mathrm{d}\Omega \\ &= \frac{\pi}{k^2}\sum_{l}(2l+1)[\mathrm{e}^{-4\eta_l}\sin^2 2\xi_l + (1-\mathrm{e}^{-2\eta_l}\cos 2\xi_l)^2] \end{aligned} \tag{6-63}$$

和总截面

$$\sigma_t = \frac{4\pi}{k}\mathrm{Im}f(0) = \frac{2\pi}{k^2}\sum_{l}(2l+1)(1-\mathrm{e}^{-2\eta_l}\cos 2\xi_l) \tag{6-64}$$

反应截面为

$$\begin{aligned} \sigma_r &= \sigma_t - \sigma_{el} \\ &= \frac{\pi}{k^2}\sum_{l}(2l+1)[2-2\mathrm{e}^{-2\eta_l}\cos 2\xi_l - \mathrm{e}^{-4\eta_l}\sin^2 2\xi_l - (1-\mathrm{e}^{-2\eta_l}\cos 2\xi_l)^2] \\ &= \frac{\pi}{k^2}\sum_{l}(2l+1)(1-\mathrm{e}^{-4\eta_l}) \end{aligned} \tag{6-65}$$

2) 有自旋–轨道耦合的情况

设

$$V(\vec{r}) = V_0(\vec{r}) + V_1(\vec{r})\vec{l}\cdot\vec{s} \tag{6-66}$$

这时入射粒子有内禀自旋 $S(\neq 0)$，由于自旋–轨道力，$(J, M)$ 才是好量子数。

(1) 实数势场的情况。令

$$\varPsi_M(\vec{r}) = \sum_{l}(w_{lJ}(r)/kr)\varphi_{lsJM}(\theta,\phi,s_z) \tag{6-67}$$

$$\varphi_{lsJM} = \sum_{m,m_s} \langle lmsm_s|JM\rangle Y_{lm}(\theta,\phi)\chi_{sm_s}(s_z) \tag{6-68}$$

把式 (6-67) 代入式 (6-48)，并计算

$$\langle\varphi_{lsJM}|[\vec{\nabla}^2 + k^2 - V]|\Psi_M\rangle = 0$$

考虑到

$$\vec{\nabla}^2 \Psi_M = \sum_{lJ} [w''_{lJ}(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} w_{lJ}(r)]/kr \cdot \varphi_{lsJM} \tag{6-69a}$$

$$\langle\varphi_{lsJM}|V|\Psi_M\rangle = (w_{lJ}/kr)V_{lJ}(r) \tag{6-69b}$$

$$V_{lJ}(r) = V_0(r) + \frac{1}{2}[J(J+1) - l(l+1) - s(s+1)]V_1(r) \tag{6-69c}$$

$$\langle\varphi_{lsJM}|\varphi_{l's'J'M'}\rangle = \delta_{ll'}\delta_{ss'}\delta_{JJ'}\delta_{MM'} \tag{6-70}$$

得

$$w''_{lJ} - \left[\frac{l(l+1)}{r^2} + V_{lJ} - k^2\right]w_{lJ} = 0 \tag{6-71}$$

考虑方程的解 $\Psi_M$ 的渐近式，因为，$V_{lJ}(r) \xrightarrow{r\to\infty} 0$，故

$$w_{lJ} \xrightarrow{r\to\infty} A_{lJ}\sin(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_{lJ}) \tag{6-72a}$$

$$\Psi_M \xrightarrow{r\to\infty} \sum_{lJ} A_{lJ}[\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-l\pi/2+\delta_{lJ})} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(kr-l\pi/2+\delta_{lJ}\}}]/2\mathrm{i}kr \cdot \varphi_{lsJM} \tag{6-72b}$$

另一方面，由设置的边界条件有

$$\begin{aligned}
&\Psi_M(\vec{r}) \xrightarrow{r\to\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}\chi_{sm_s} + \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} f_{m_s}(\theta,\phi,s_z) \\
=&\sum_l (2l+1)\mathrm{i}^l[\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-l\pi/2)} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(kr-l\pi/2)}]/2\mathrm{i}kr \cdot P_l(\cos\theta)\chi_{sm_s} + \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} f_{m_s}(\theta,\phi,s_z) \\
=&\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} f_{m_s}(\theta,\phi,s_z) \\
&+ \sum_{lJ} \sqrt{4\pi(2l+1)}\,\mathrm{i}^l[\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-l\pi/2)} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(kr-l\pi/2)}]/2\mathrm{i}kr \cdot \langle l0sm_s|JM\rangle\varphi_{lsJM}
\end{aligned} \tag{6-73}$$

计算式 (6-73) 时用到

$$P_l(\cos\theta) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_{l0}(\theta,\phi)$$

$$Y_{l0}(\theta,\phi)\chi_{sm_s}(s_z) = \sum_J \langle l0sm_s|JM\rangle\varphi_{lsJM} \tag{6-74}$$

比较式 (6-72b) 和式 (6-73) 中向内球面波的系数，得到

$$A_{lJ} = \sqrt{4\pi(2l+1)}\mathrm{i}^l \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_{lJ}} \langle l0sm_s|JM\rangle \tag{6-75}$$

由式 (6-73) 减去式 (6-72b) 并考虑条件 (6-75)，从向外球面波得到散射振幅

$$\begin{aligned} f_{m_s}(\theta,\phi,s_z) &= \frac{1}{2\mathrm{i}k}\sum_{lJ}[\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_{lJ}}-1]\sqrt{4\pi(2l+1)}\langle l0sm_s|JM\rangle\varphi_{lsJM} \\ &= \frac{\mathrm{i}}{2\mathrm{i}k}\sum_{lJm'm'_s}[\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_{lJ}}-1]\sqrt{4\pi(2l+1)}\langle l0sm_s|JM\rangle \\ &\quad \langle lm'sm'_s|JM\rangle Y_{lm'}(\theta,\varphi)\chi_{sm'_s}(s_z) \end{aligned} \tag{6-76}$$

用 $f_{m_s}$ 可计算各种截面。

① $s=1/2$。

因

$$\langle l0sm_s|JM\rangle = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{l+1}{2l+1}}, & J=l+\dfrac{1}{2} \\ -2m_s\sqrt{\dfrac{l}{2l+1}}, & J=l-\dfrac{1}{2} \end{cases}$$

故

$$\begin{aligned} \sigma_{\mathrm{el}} &= \sum_{s_z}\int \mathrm{d}\Omega|f_{m_s}(\theta,\phi,s_z)|^2 = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{lJ}\left|\frac{\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_{lJ}}-1}{2\mathrm{i}}\right|^2(2l+1)|\langle l0sm_s|JM\rangle|^2 \\ &= \frac{4\pi}{k^2}\sum_l\left[(l+1)\left|\frac{\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_{l+}}-1}{2\mathrm{i}}\right|^2 + l\left|\frac{\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_{l-}}-1}{2\mathrm{i}}\right|^2\right] \\ &= \frac{4\pi}{k^2}\sum_l[(l+1)\sin^2\delta_{l+} + l\sin^2\delta_{l-}] \end{aligned} \tag{6-77}$$

此处 $\delta_{l+}=\delta_{l,J=l+1}$，$\delta_{l-}=\delta_{l,J=l-1}$。容易验证光学定理的正确性。因

$$Y_{l0}(0,0) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}$$

$$f(0) = \langle\chi_{sm_s}|f_{m_s}(0,0,s_z)\rangle = \frac{1}{k}\sum_{lJ}(2l+1)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_{lJ}}\sin\delta_{lJ}\langle l0sm_s|JM\rangle^2 \tag{6-78a}$$

故

$$\begin{aligned} \sigma_t &= \frac{4\pi}{k}\mathrm{Im}f(0) = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{lJ}(2l+1)\sin^2\delta_{lJ}\langle l0sm_s|JM\rangle^2 \\ &= \frac{4\pi}{k^2}\sum_l[(l+1)\sin^2\delta_{l+} + l\sin^2\delta_{l_} = \sigma_{el} \end{aligned} \tag{6-78b}$$

总截面等于弹性散射截面，对于势场散射，这是正确的结论。

② $s = 1$。

$\langle l0sm_s|JM\rangle$ 的取值见表 6-2。

**表 6-2** $\langle l0sm_s|JM\rangle$ 表

| $m_s$ | 1 | 0 | $-1$ |
|---|---|---|---|
| $J = l+1$ | $\left[\dfrac{(l+1)(l+2)}{(2l+1)(2l+2)}\right]^{1/2}$ | $\left[\dfrac{(l+1)(l+1)}{(2l+1)(l+1)}\right]^{1/2}$ | $\left[\dfrac{(l+1)(l+2)}{(2l+1)(2l+2)}\right]^{1/2}$ |
| $J = l$ | $-\left[\dfrac{(l+1)l}{2l(l+1)}\right]^{1/2}$ | 0 | $\left[\dfrac{(l+1)l}{2l(l+1)}\right]^{1/2}$ |
| $J = l-1$ | $\left[\dfrac{(l-1)l}{2l(2l+1)}\right]^{1/2}$ | $-\left[\dfrac{l\cdot l}{l(2l+1)}\right]^{1/2}$ | $\left[\dfrac{l(l-1)}{2l(2l+1)}\right]^{1/2}$ |

将 $s = 1$ 对应的式 (6-77) 对 $m_s$ 求平均，得

$$\sigma_{el} = \frac{4\pi}{3k^2}\sum_l \{(2l+3)\sin^2\delta_{l+} + (2l+1)\sin^2\delta_{l0} + (2l-1)\sin^2\delta_{l\text{-}}\} \tag{6-79}$$

计算式 (6-79) 用到

$$\sum_{m_s}\langle l01m_s|l+1,m_s\rangle^2 = \frac{2l+3}{2l+1}$$

$$\sum_{m_s}\langle l01m_s|l,m_s\rangle^2 = 1$$

$$\sum_{m_s}\langle l01m_s|l-1,m_s\rangle^2 = \frac{2l-1}{2l+1}$$

其中，$\delta_{l+} = \delta_{l,J=l+1}$，$\delta_{l0} = \delta_{l,J=l}$，$\delta_{l-} = \delta_{l,J=l-1}$。同样可以验证光学定理，即 $\sigma_t = \sigma_{el}$。

(2) 复数势场的情况　复势要产生复的相移, 故须作代换 $\delta_{lJ} = \xi_{lJ} + i\eta_{lJ}$。

① $s = 1/2$。

$$\begin{aligned}\sigma_{el} &= \frac{4\pi}{k^2}\sum_l\left\{(l+1)|\frac{\mathrm{e}^{2\mathrm{i}(\xi_{l+}+\mathrm{i}\eta_{l+})}-1}{2\mathrm{i}}|^2 + l|\frac{\mathrm{e}^{2\mathrm{i}(\xi_{l-}+\mathrm{i}\eta_{l-})}-1}{2\mathrm{i}}|^2\right\}\\ &= \frac{\pi}{k^2}\sum_l\{(l+1)[\mathrm{e}^{-4\eta_{l+}}\sin^2 2\xi_{l+} + (1-\mathrm{e}^{-2\eta_{l+}}\cos 2\xi_{l+})^2]\\ &\quad + l[\mathrm{e}^{-4\eta_{l-}}\sin^2 2\xi_{l\text{-}} + (1-\mathrm{e}^{-2\eta_{l-}}\cos 2\xi_{l-})^2]\}\end{aligned} \tag{6-80}$$

用光学定理求得

$$\sigma_t = \frac{2\pi}{k^2}\sum_l\{(l+1)(1-\mathrm{e}^{-2\eta_{l+}}\cos 2\xi_{l+}) + l(1-\mathrm{e}^{-2\eta_{l-}}\cos 2\xi_{l-})\} \tag{6-81}$$

$$\sigma_r = \sigma_t - \sigma_{el} == \frac{\pi}{k^2}\sum_l\{(l+1)(1-\mathrm{e}^{-4\eta_{l+}}) + l(1-\mathrm{e}^{-4\eta_{l-}})\} \tag{6-82}$$

② $s=1$

$$\begin{aligned}\sigma_{el}=&\frac{\pi}{3k^2}\sum_l\{(2l+3)[\mathrm{e}^{-4\eta_{l+}}\sin^2 2\xi_{l+}+(1-\mathrm{e}^{-2\eta_{l+}}\cos 2\xi_{l+})^2]\\&+(2l+1)[\mathrm{e}^{-4\eta_{l0}}\sin^2 2\xi_{l0}+(1-e^{-2\eta_{l-}}\cos 2\xi_{l0})^2]\\&+(2l-1)[\mathrm{e}\sin^2 2\xi_{l_-}+(1-\mathrm{e}^{-2\eta_{l-}}\cos 2\xi_{l-})^2]\}\end{aligned}\tag{6-83}$$

$$\begin{aligned}\sigma_t=&\frac{2\pi}{3k^2}\sum_l\{(2l+3)(1-\mathrm{e}^{-2\eta_{l+}}\cos 2\xi_{l+})\\&+(2l+1)(1-\mathrm{e}^{-2\eta_{l0}}\cos 2\xi_{l0})+(2l-1)(1-\mathrm{e}^{-2\eta_{l-}}\cos 2\xi_{l-})\}\end{aligned}\tag{6-84}$$

$$\begin{aligned}\sigma_r=&\frac{\pi}{3k^2}\sum_l\{(2l+3)(1-\mathrm{e}^{-4\eta_{l+}})\\&+(2l+1)(1-\mathrm{e}^{-4\eta_{l0}})+(2l-1)(1-\mathrm{e}^{-4\eta_{l-}})\}\end{aligned}\tag{6-85}$$

3) 存在 Coulomb 场的情况

Coulomb 场是长程力，影响波函数的渐近形式, 产生 Coulomb 相移。设 Schroedinger 散射方程的解为

$$\varPsi_M=\sum_{lJ}\frac{w_{lJ}(r)}{kr}\varphi_{lsJm}$$

因有 Coulomb 场时，Schroedinger 散射方程的径向波函数的解的渐近波函数中包含 Coulomb 场对相位的贡献 $\sigma_l$ 和待求的核力的贡献 $\delta_{lJ}$, 其渐近式为

$$\begin{aligned}&w_{lJ}\overset{r\to\infty}{\longrightarrow}A_{lJ}\sin(kr-\eta\ln 2kr-\frac{l\pi}{2}+\sigma_l+\delta_{lJ})\\=&A_{lJ}[\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-\eta\ln 2kr-l\pi/2+\sigma_l+\delta_{lJ})}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(kr-\eta\ln 2kr-l\pi/2+\sigma_l+\delta_{lJ})}]/2\mathrm{i}\end{aligned}\tag{6-86}$$

式中，Sommerfeld 参数 $\eta=\dfrac{Z_1Z_2e^2}{\hbar v}$ 是 Coulomb 相互作用参数，$\sigma_e$ 是纯 Coulomb 力引起的相移，已由 Rutherford 散射的分波法求解得到，$\delta_{lJ}$ 是核力引起的相对于 Coulomb 散射波函数的相移, 是本小节要计算的。另一方面，存在 Coulomb 场时，人们设置的波函数的边界条件是入射的 Coulomb 平面波函数加上散射的球面波, 即

$$\begin{aligned}&\varPsi_M(\vec{r})\overset{r\to\infty}{\longrightarrow}\mathrm{e}^{\mathrm{i}[kz+\eta\ln k(r-z)]}\chi_{sm_s}+\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-\eta\ln 2kr)}}{r}f_{m_s}(\theta,\phi,s_z)\\=&\sum_l(2l+1)\mathrm{i}^l[\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-\eta\ln 2krl\pi/2)}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(kr-\eta\ln 2kr-l\pi/2)}]/2\mathrm{i}kr\cdot P_l(\cos\theta)\chi_{sm_s}\\&+\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-\eta\ln 2kr)}}{r}f_{m_s}(\theta,\phi,s_z)\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&=\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}f_{m_s}(\theta,\phi,s_z)+\\
&\quad\sum_{lJ}\sqrt{4\pi(2l+1)}\mathrm{i}^l[\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-l\pi/2)}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(kr-l\pi/2)}]/2\mathrm{i}kr\cdot\langle l0sm_s|JM\rangle\varphi_{lsJM}\\
&=\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-\eta\ln 2kr)}}{r}f_{m_s}(\theta,\phi,s_z)+\sum_{lJ}\sqrt{4\pi(2l+1)}\mathrm{i}^l\\
&\quad\times[\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-\eta\ln 2kr-l\pi/2)}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(kr-\eta\ln 2kr-l\pi/2)}]/2\mathrm{i}kr\cdot\langle l0sm_s|JM\rangle\varphi_{lsJM}
\end{aligned}
\tag{6-87}
$$

比较同一边界条件的表达式 (6-86) 和式 (6-87)中向内球面波的系数，得

$$
A_{lJ}=\sqrt{4\pi(2l+1)}\mathrm{i}^l\langle l0sm_s|JM\rangle\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\sigma_l+\delta_{lJ})}
$$

再比较向外球面波的系数，得

$$
f_{m_s}(\theta,\phi,s_z)=\frac{1}{2\mathrm{i}k}\sum_{lJ}[\mathrm{e}^{2\mathrm{i}(\sigma_L+\delta_{lJ})}-1]\sqrt{4\pi(2l+1)}\langle l0sm_s|JM\rangle\varphi_{lsJM}
\tag{6-88}
$$

由此可见，存在 Coulomb 力时，散射振幅公式与无 Coulomb 力时形式一样，差别在于以 $(\sigma_l+\delta_{lJ})$ 代替 $\delta_{lJ}$。因此截面公式的形式也一样，只需作上述替换。设

$$
(\sigma_l+\delta_{lJ})=\xi_{lJ}+\mathrm{i}\eta_{lJ}
\tag{6-89}
$$

则可求得各种场合下的截面公式。

① $s=0$。

弹性散射截面

$$
\sigma_{el}=\frac{\pi}{k^2}\sum_l(2l+1)[\mathrm{e}^{-4\eta_l}\sin^2 2\xi_l+(1-\mathrm{e}^{-2\eta_l}\cos 2\xi_l)^2]
\tag{6-90a}
$$

总截面

$$
\sigma_t=\frac{4\pi}{k}I_mf(0)=\frac{2\pi}{k^2}\sum_l(2l+1)(1-\mathrm{e}^{-2\eta_l}\cos 2\xi_l)
\tag{6-90b}
$$

反应截面

$$
\begin{aligned}
\sigma_r&=\sigma_t-\sigma_{el}\\
&=\frac{\pi}{k^2}\sum_l(2l+1)(1-\mathrm{e}^{-4\eta_l})
\end{aligned}
\tag{6-90c}
$$

② $s=1/2$。

$$
\begin{aligned}
\sigma_{el}=&\frac{\pi}{k^2}\sum_l\{(l+1)[\mathrm{e}^{-4\eta_{l+}}\sin^2 2\xi_{l+}+(1-\mathrm{e}^{-2\eta_{l+}}\cos 2\xi_{l+})^2]\\
&+l[\mathrm{e}^{-4\eta_{l-}}\sin^2 2\xi_{l-}+(1-\mathrm{e}^{-2\eta_{l-}}\cos 2\xi_{l-})^2]\}
\end{aligned}
\tag{6-91a}
$$

$$\sigma_t = \frac{2\pi}{k^2}\sum_l \{(l+1)(1-\mathrm{e}^{-2\eta_{l+}}\cos 2\xi_{l+}) + l(1-\mathrm{e}^{-2\eta_{l-}}\cos 2\xi_{l-})\} \tag{6-91b}$$

$$\sigma_r = \sigma_t - \sigma_{el} == \frac{\pi}{k^2}\sum_l \{(l+1)(1-\mathrm{e}^{-4\eta_{l+}}) + l(1-\mathrm{e}^{-4\eta_{l-}})\} \tag{6-91c}$$

③ $s=1$。

$$\begin{aligned}\sigma_{el} =&\frac{\pi}{3k^2}\sum_l \{(2l+3)[\mathrm{e}^{-4\eta_{l+}}\sin^2 2\xi_{l+} + (1-\mathrm{e}^{-2\eta_{l+}}\cos 2\xi_{l+})^2] \\ &+ (2l+1)[\mathrm{e}^{-4\eta_{l0}}\sin^2 2\xi_{l0} + (1-\mathrm{e}^{-2\eta_{l-}}\cos 2\xi_{l0})^2] \\ &+ (2l-1)[\mathrm{e}^{-4\eta_{l-}}\sin^2 2\xi_{l_} + (1-\mathrm{e}^{-2\eta_{l-}}\cos 2\xi_{l-})^2]\}\end{aligned} \tag{6-92a}$$

$$\begin{aligned}\sigma_t =&\frac{2\pi}{3k^2}\sum_l \{(2l+3)(1-\mathrm{e}^{-2\eta_{l+}}\cos 2\xi_{l+}) \\ &+ (2l+1)(1-\mathrm{e}^{-2\eta_{l0}}\cos 2\xi_{l0}) + (2l-1)(1-\mathrm{e}^{-2\eta_{l-}}\cos 2\xi_{l-})\}\end{aligned} \tag{6-92b}$$

$$\begin{aligned}\sigma_r =&\frac{\pi}{3k^2}\sum_l \{(2l+3)(1-\mathrm{e}^{-4\eta_{l+}}) \\ &+ (2l+1)(1-\mathrm{e}^{-4\eta_{l0}}) + (2l-1)(1-\mathrm{e}^{-4\eta_{l-}})\}\end{aligned} \tag{6-92c}$$

2. 相移的计算

从前面的截面公式可知，只要知道各个分波的相移 $(\sigma_l + \delta_{lJ})$，就可以计算各种截面。现在讨论相移的计算。按定义，相移是通过比较波函数的严格解的渐近式 (可以数值计算) 与核力力程以的外波函数的形式 (有解析式) 来确定的。所以计算相移的基本思路是①求波函数的严格数值解；②求核力力程以外的波函数的解析式；③在核力力程以外某一点把两种波函数光滑地连接起来 (对数微商相等)，从而确定相移。

前面已指出，散射解可写成

$$\varPsi_M = \sum_{lJ} A_{lJ}\frac{w_{lJ}(r)}{kr}\varphi_{lsJm} \tag{6-93}$$

其中径向波函数 $w_{lJ}$ 满足

$$w_{lJ}'' - \left[\frac{l(l+1)}{r^2} + V_{lJ} - k^2\right]w_{lJ} = 0 \tag{6-94}$$

其中 $V_{lJ}$ 包括核力与 Coulomb 力，一般是复势。方程 (6-94) 可用数值方法求解，现假定 $w_{lJ}$ 的数值解已求得。在核力力程以外 $V_{lJ}$ 中只剩 Coulomb 力，方程 (6-94) 化为 Coulomb 场中的散射方程 ($r$ 趋于很大时)，

$$w_{lJ}'' - \left[\frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2\eta k}{r} - k^2\right]w_{lJ} = 0 \tag{6-95}$$

式 (6-95) 是著名的 Coulomb 场中的径向波函数的方程, 由于是二阶方程, 有两个独立的特解，规则解 $F_l(r)$ 与不规则解 $G_l(r)$，通解是它们的线性叠加

$$\varPsi_M \overset{r\to\infty}{\longrightarrow} \sum_{lJ} \frac{A_{lJ}}{kr}[F_l\cos(\sigma_l+\delta_{lJ})+G_l\sin(\sigma_l+\delta_{lJ})]\varphi_{lsJM}$$

对于纯 Coulomb(无核力) 散射，其解早已求出

$$\varPsi_C = \sum_{lJ}\sqrt{4\pi(2l+1)}\mathrm{i}^l\langle l0sm_s|JM\rangle\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\sigma_l}}{kr}[F_l\cos\sigma_l+G_l\sin\sigma_l]\varphi_{lsJM}$$

有核力时, 极限过渡要求在纯 Coulomb 散射相移外加上核力的贡献 $\sigma_l\to\sigma_l+\delta_{lJ}$，故

$$\begin{aligned}\varPsi_M &\overset{r\to\infty}{\longrightarrow} \sum_{lJ}\sqrt{4\pi(2l+1)}\mathrm{i}^l\langle l0sm_s|JM\rangle\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\sigma_l+\delta_{lJ})}}{kr}[F_l\cos(\sigma_l+\delta_{lJ})\\ &\quad+G_l\sin(\sigma_l+\delta_{lJ})]\varphi_{lsJM}\\ &=\frac{1}{2}\sum_{lJ}\sqrt{4\pi(2l+1)}\mathrm{i}^l\langle l0sm_s|JM\rangle\frac{1}{kr}[(F_l+\mathrm{i}G_l)\\ &\quad+\mathrm{e}^{2\mathrm{i}(\sigma_l+\delta_{lJ})}(F_l-\mathrm{i}G_l)]\varphi_{lsJM}\end{aligned} \tag{6-96}$$

考虑每一分波的边界内、外的波函数在 $R_C$ 点的连续性条件 (对数微商相等)

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\ln(w_{lJ})|_{R_C}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\ln\{(F_l+\mathrm{i}G_l)+\mathrm{e}^{2\mathrm{i}(\sigma_l+\delta_{lJ})}(F_l-\mathrm{i}G_l)\}|_{R_C}$$

得

$$\frac{F_l'(\rho)+\mathrm{i}G_l'(\rho)+\mathrm{e}^{2\mathrm{i}(\sigma_l+\delta_{lJ})}[F_l'(\rho)-\mathrm{i}G_l'(\rho)]}{[F_l(\rho)+\mathrm{i}G_l(\rho)]+\mathrm{e}^{2i(\sigma_l+\delta_{lJ})}[F_l(\rho)-\mathrm{i}G_l(\rho)]}|_{\rho_C}=\frac{w_{lJ}'}{w_{lJ}}|_{\rho_C}=D_{lJ} \tag{6-97}$$

由此求解得

$$\mathrm{e}^{2\mathrm{i}(\sigma_l+\delta_{lJ})}=\frac{F_l'(\rho)+\mathrm{i}G_l'(\rho)-D_{lJ}[F_l(\rho)+\mathrm{i}G_l(\rho)]}{[F_l(\rho)-\mathrm{i}G_l(\rho)]D_{lJ}-[F_l'(\rho)-\mathrm{i}G_l'(\rho)]}|_{\rho_C} \tag{6-98}$$

式中，$\rho=kr,\rho_C=kR_C$，$R_C$ 是连接点的半径，须选在核力力程之外。求得内部区域的数值解 $w_{lJ}$，即可计算 $D_{lJ}$。而 Coulomb 波函数 $F_l(r)$ 和 $G_l(r)$ 是已知的，有表可查。利用式 (6-98) 及 $D_{lJ}$, $F_l(\rho_C)$,$G_l(\rho_C)$, $F_l'(\rho_C)$, 和 $G_l'(\rho_C)$ 的数值, 即可计算相移 $(\sigma_l+\delta_{lJ})$。

对于中性粒子散射，$\eta=0,\sigma_l=0$。

$$F_l/kr\to\mathrm{j}_l(\rho),G_l/kr\to-\mathrm{n}_l(\rho),$$

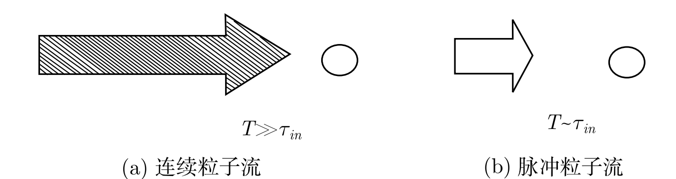
$$\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_{lJ}}=\frac{[(\mathrm{j}_l(\rho)+\rho\mathrm{j}_l')-\mathrm{i}(\mathrm{n}_l+\rho\mathrm{n}_l')-D_{lJ}[\mathrm{j}_l(\rho)-\mathrm{i}\mathrm{n}_l(\rho)]\rho}{\rho[\mathrm{j}_l(\rho)+\mathrm{i}\mathrm{n}_l(\rho)]D_{lJ}-[(\mathrm{j}_l(\rho)+\rho\mathrm{j}_l')+\mathrm{i}(\mathrm{n}_l(\rho)+\rho\mathrm{n}_l')]}|_{\rho_C} \tag{6-99}$$

式中 $\mathrm{j}_l(r)$ 和 $\mathrm{n}_l(r)$ 是球贝塞尔函数和球诺曼函数, 也有表可查。

至此, 我们介绍了计算散射振幅和散射截面的两种方法: 散射振幅的 Green 函数积分计算法和分波相移的微分方程计算法, 前者比较简练, 后者比较精密, 可以根据需要选用。

## 6.4 散 射 矩 阵

前面几节介绍的是散射和反应问题的定态量子理论, 是碰撞问题的时间无关的定态描述，基于定态 Schroedinger 方程, 相应的实验条件是碰撞期间有稳定的入射粒子流，从而能够形成散射或反应问题的定态解。本节介绍的是散射问题的时间有关的非定态处理，基于时间有关的 Schroedinger 方程, 相应的实验条件是碰撞期间有短脉冲的入射粒子流，不能够形成散射或反应问题的定态解 (图 6-4)。这两种处理方法得到的结果是相同的, 而后一种处理方法与量子场论中的散射矩阵 (S- 矩阵)[7,8] 处理方法是一致的。散射问题的定态和非定态入射粒子流如图 6-4 所示。




(a) 连续粒子流　　(b) 脉冲粒子流

图 6-4 散射问题的定态 (a) 和非定态 (b) 图像 ($T$ 是粒子流持续时间, $\tau_{in}$ 是碰撞和反应时间)

### 6.4.1 量子力学处理问题的三种绘景

散射问题的时间有关的非定态处理要用到相互作用表象。量子力学处理问题有三种绘景 (picture), 类似于三种表象 (representation), 简述如下。

1. Schroedinger 绘景

其特点是：

(1) 状态波函数随时间变化，由 Schroedinger 方程决定, 即

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial \psi_s}{\partial t} = \hat{H}\psi_s \tag{6-100}$$

其解为

$$\psi_s(t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\psi_s(0) \tag{6-101}$$

(2) 力学量不随时间变化, 即

$$\hat{O}_s = \hat{O}(0), \langle \hat{O}_s \rangle = \langle \psi_s(t)|\hat{O}(0)|\psi_s(t)\rangle$$

在 Schroedinger 绘景中，全部动力学演化的信息都包含在状态波函数之中。

2. Heisenbeng 绘景

其特点是：

(1) 力学量随时间变化，由 Heisenbeng 方程决定，即

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}\hat{O}_H(t)}{\mathrm{d}t} = [\hat{O}_H(t), \hat{H}] \tag{6-102}$$

其解为

$$\hat{O}_H(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\hat{O}(0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar} \tag{6-103}$$

(2) 状态波函数不随时间变化，即

$$\psi_H(t) = \psi_H(0) = \psi_s(0) \tag{6-104}$$

显然

$$\hat{H}_H(t) = \hat{H}(0) = \hat{H} \tag{6-105}$$

在 Heisenbeng 绘景中，全部动力学演化的信息都包含在力学量算符之中。由力学量的平均值

$$\begin{aligned} \langle \hat{O}(t)\rangle &= \langle \psi_H(0)|\hat{O}_H(t)|\psi_H(0)\rangle = \langle \psi_s(0)|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\hat{O}_s(0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}|\psi_s(0)\rangle \\ &= \langle \psi_s(t)|\hat{O}_s(0)|\psi_s(t)\rangle \end{aligned} \tag{6-106}$$

可见，两种不同的绘景只不过是时间演化算子 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}$ 的不同放置而已, 放在波函数上就是 Schroedinger 绘景，放在力学量算子上，就是 Heisenbeng 绘景。

3. 相互作用绘景

设系统的 Hamilton 量可以分成两部分：可以求解的 $\hat{H}_0$(如平均场部分) 和微扰项 $\hat{V}$(如剩余相互作用部分)

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \tag{6-107}$$

相互作用绘景 ( interacting picture ) 的特点是

(1) 力学量随时间的变化由 $\hat{H}_0$ 决定，即

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}\hat{O}_{in}(t)}{\mathrm{d}t} = [\hat{O}_{in}(t), \hat{H}_0] \tag{6-108}$$

其解为

$$\hat{O}_{in}(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}_0 t/\hbar}\hat{O}_s(0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_0 t/\hbar} \tag{6-109}$$

$$\hat{V}_{in}(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}_0 t/\hbar}\hat{V}_s(0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_0 t/\hbar}$$

显然

$$\hat{H}_{0in}(t) = \hat{H}_{0s}(0) = \hat{H}_0 \tag{6-110}$$

(2) 状态波函数的变化由微扰 $\hat{V}_{in}(t)$ 决定，令

$$\psi_{in}(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}_0 t/\hbar}\psi_s(t), \quad \psi_s(t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_0 t/\hbar}\psi_{in}(t) \tag{6-111}$$

代入 $\psi_s(t)$ 的 Schroedinger 方程 (6-100)

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi_s}{\partial t} = \hat{H}\psi_s = (\hat{H}_0 + \hat{V})\psi_s \tag{6-112}$$

得到 $\psi_{in}(t)$ 的运动方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi_{in}(t)}{\partial t} = \hat{V}_{in}(t)\psi_{in}(t) \tag{6-113}$$

### 6.4.2 相互作用绘景中状态随时间的演化和时间演化算符

假设散射问题中的 Hamilton 量可表示为式 (6-107)

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$$

其中，$H_0$ 包括自由状态下的入射粒子的 Hamilton 量和靶粒子的 Hamilton 量，$V$ 表示入射粒子与靶粒子的相互作用，设 $V$ 具有有限力程而且比较弱。处理散射问题，采用相互作用绘景在计算上是方便的。在此表象中，波函数随时间演化完全归之于 $V$ 的影响，满足式 (6-113)

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi_{in}(t)}{\partial t} = \hat{V}_{in}(t)\psi_{in}(t)$$

其中

$$\hat{V}_{in}(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}_0 t/\hbar}\hat{V}_s(0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_0 t/\hbar} \tag{6-114}$$

设

$$|\psi_{in}(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\psi_{in}(t_0)\rangle \tag{6-115}$$

$\hat{U}(t, t_0)$ 是时间演化的算符, 描述状态随时间的动力学演化。把式 (6-115) 代入式 (6-113)，得到

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\hat{U}(t, t_0)\psi_{in}(t_0)}{\partial t} = \hat{V}_{in}(t)\hat{U}(t, t_0)\psi_{in}(t_0)$$

由于初态 $\psi_{in}(t_0)$ 是任意的，可得出时间演化的算符$\hat{U}(t, t_0)$ 满足的微分方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\hat{U}(t, t_0)}{\partial t} = \hat{V}_{in}(t)\hat{U}(t, t_0) \tag{6-116}$$

并满足初始条件

$$\hat{U}(t_0, t_0) = 1 \tag{6-117}$$

显然

$$|\psi_{in}(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\psi_{in}(t_0)\rangle = \hat{U}(t, t')\hat{U}(t', t_0)|\psi_{in}(t_0)\rangle$$

与式 (6-115) 比较，有

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}(t, t')\hat{U}(t', t_0) \tag{6-118}$$

即 $\hat{U}(t, t')$ 有传递性。假设 $V$ 是 Hermite 算符，$V^+ = V$, 则式 (6-116) 取 Hermite 共轭为

$$-\mathrm{i}\hbar \frac{\partial \hat{U}(t, t_0)}{\partial t}^+ = \hat{U}(t, t_0)^+ \hat{V}_{in}(t) \tag{6-119}$$

由式 (6-116) 和式 (6-119), 易于得出

$$\frac{\partial}{\partial t}[U(t, t_0)U(t, t_0)] = 0 \tag{6-120}$$

即 $U(t, t)^+ U(t, t_0) =$ 常数 (不依赖于时间 $t$)，但 $U(t_0, t_0) = 1$, 由此得出

$$U(t, t_0)^+ U(t, t_0) = 1, \quad \text{幺正性} \tag{6-121}$$

它是几率守恒的反映。考虑到初始条件 (6-117)，方程 (6-116) 可表示成积分方程形式

$$U(t, t_0) = 1 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t' V_{in}(t') U(t', t_0) \tag{6-122}$$

### 6.4.3 时间演化的算符的微扰论展开与散射矩阵

1. 时间演化的算符的微扰论展开

当相互作用 $V$ 较弱可以看成微扰时，则可用微扰论逐级迭代求解积分方程 (6-122) 得到如下收敛的级数解

$$\begin{aligned} U(t, t_0) &= 1 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_1 V_{in}(t_1) + \frac{(-\mathrm{i})^2}{\hbar}\int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_1 \int_{t_0}^{t_1} \mathrm{d}t_1 V_{in}(t_1) V_{in}(t_2) + \cdots \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{-\mathrm{i}}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_1 \int_{t_0}^{t_1} \mathrm{d}t_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} \mathrm{d}t_n V_{in}(t_1) V_{in}(t_2) \cdots V_{in}(t_n) \end{aligned} \tag{6-123}$$

为使解的形式对称化，引进编时乘积算符 (chronological ordering operator)$\hat{T}$, 定义如下：

$$\hat{T}[V_{in}(t_1) V_{in}(t_2) \cdots V_{in}(t_n)] = V_{in}(t_i) V_{in}(t_j) \cdots V_{in}(t_n) \tag{6-124}$$

$$t_1 > t_2 > \cdots > t_n$$

即按时间先后从右到左排列。利用此算符，可把微扰论展开式 (6-123) 表示成简洁而对称的形式。例如，$n=2$ 的项 (二级微扰) 可用 $J_2$ 表示出来

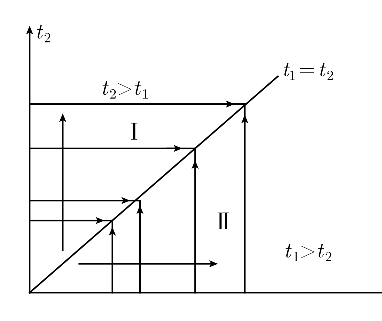



图 6-5 两个积分区间

$$J_2=\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_1\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_2 T[V_{in}(t_1)V_{in}(t_2)]$$

因为利用

$$\hat{T}[V_{in}(t_1)V_{in}(t_2)]=\begin{cases}V_{in}(t_1)V_{in}(t_2) & t_1>t_2\\ V_{in}(t_2)V_{in}(t_1) & t_1<t_2\end{cases}$$

可以把 $J_2$ 分成两部分 (图 6-5)

$$\begin{aligned}J_2=&\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_1\int_{t_0}^{t_1}\mathrm{d}t_2V_{in}(t_1)V_{in}(t_2)\qquad(t_1>t_2)\\&+\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_2\int_{t_0}^{t_2}\mathrm{d}t_1V_{in}(t_2)V_{in}(t_1)\qquad(t_2>t_1)\end{aligned}$$

第二项积分变量互换 ($t_1\longleftrightarrow t_2$) 后，与第一项相同。所以

$$J_2=2!\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_1\int_{t_0}^{t_1}\mathrm{d}t_2V_{in}(t_1)V_{in}(t_2)$$

以上分析可推广到微扰论任意 $n$- 阶项，最后可得

$$\hat{U}(t,t_0)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{-\mathrm{i}}{\hbar}\right)^n\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_1\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_2\cdots\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_n\hat{T}(V_{in}(t_1)V_{in}(t_2)\cdots V_{in}(t_n))\quad(6\text{-}125)$$

形式上还可简记为

$$\hat{U}(t,t_0)=\hat{T}\exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t'\hat{V}_{in}(t')\right]\quad(6\text{-}126)$$

2. 散射矩阵

在有限力程假定下，入射前, 入射粒子与靶粒子相距很远，相互作用可不必考虑，体系状态用 $|\psi(-\infty)\rangle$ 描述 (包括相对运动以及它们的内部状态)。同样，两粒子碰撞之后，彼此将远远离开，相互作用也不必考虑，体系状态用 $|\psi(+\infty)\rangle$ 描述。定义散射算符$S$，

$$S|\psi(-\infty)\rangle=|\psi(+\infty)\rangle\to S=\hat{U}(+\infty,-\infty)\quad(6\text{-}127)$$

$S$- 矩阵把渐近初态 $|\psi(-\infty)\rangle$ 转化为渐近末态 $|\psi(+\infty)\rangle$。考虑到几率守恒，$\langle\psi(+\infty)|\psi(+\infty)\rangle=\langle\psi(-\infty)|\psi(-\infty)\rangle$, 要求

$$S^{+}S=SS^{+}=1\to S^{+}=S^{-1}\quad(6\text{-}128)$$

与式 (6-121) 一致。

设 $|\varphi_\alpha\rangle$ 表示包括 $\hat{H}_0$ 在内的一组力学量完全集的共同本征态

$$\hat{H}_0|\varphi_\alpha\rangle = E_\alpha|\varphi_\alpha\rangle \tag{6-129}$$

所有 $|\varphi_\alpha\rangle$ 构成体系的一组正交完备的状态集，$E_\alpha$ 一般包括连续谱与分立谱。考虑到相互作用 $V$ 的力程是短程的，当两粒子相距很远时，不必考虑 $V$，因此 $|\psi(-\infty)\rangle$ 与 $|\psi(+\infty)\rangle$ 均可用 $|\varphi_\alpha\rangle$ 展开

$$|\psi(-\infty)\rangle = \sum_\alpha a_\alpha|\varphi_\alpha\rangle, \quad |\psi(+\infty)\rangle = \sum_\beta b_\beta|\varphi_\beta\rangle \tag{6-130}$$

于是式 (6-127) 可表示成

$$\sum_\beta b_\beta|\varphi_\beta\rangle = \sum_\alpha a_\alpha S|\varphi_\alpha\rangle = \sum_{\alpha\beta} a_\alpha|\varphi_\beta\rangle\langle\varphi_\beta|S|\varphi_\alpha\rangle = \sum_{\alpha\beta} a_\alpha S_{\beta\alpha}|\varphi_\beta\rangle$$

式中

$$S_{\beta\alpha} = \langle\varphi_\beta|S|\varphi_\alpha\rangle \tag{6-131}$$

由此得

$$b_\beta = \sum_\alpha S_{\beta\alpha}a_\alpha \tag{6-132}$$

$S_{\beta\alpha}$ 即散射算符 $S$ 在 $\hat{H}_0$ 表象中的表示，称为散射矩阵(scattering matrix)。$|b_\beta|^2$ 代表测得末态处于 $\varphi_\beta$ 态的几率。设初态 $|\varphi(-\infty)\rangle = |\varphi_{\alpha_0}\rangle$，即式 (6-130) 中 $a_\alpha = \delta_{\alpha\alpha_0}$，此时，式 (6-132) 给出 $b_\beta = S_{\beta\alpha_0}$，$|S_{\beta\alpha_0}|^2$ 代表从初态 $\varphi_{\alpha_0}$ 跃迁到末态 $\varphi_\beta$ 的几率。按几率守恒，有

$$\sum_\beta |b_\beta|^2 = \sum_\beta |S_{\beta\alpha_0}|^2 = 1$$

式中 $\alpha_0$ 是任意指定的。所以几率守恒的一般表示为

$$\sum_\beta |S_{\beta\alpha}|^2 = 1 \tag{6-133}$$

$|S_{\beta\alpha}|^2$ 表示从 $|\varphi_\alpha\rangle$ 态到 $|\varphi_\beta\rangle$ 态的跃迁几率。式 (6-133) 是幺正性 (6-128) 在 $\hat{H}_0$ 表象中的表示式。

通常所说的跃迁几率，是指末态不同于初态的情况。为此，定义跃迁算符

$$T = S - I \tag{6-134}$$

当 $\beta \neq \alpha$ 时，$S_{\beta\alpha} = T_{\beta\alpha}$。所以跃迁几率也可以表示成

$$W_{\beta\alpha} = |S_{\beta\alpha}|^2 = |T_{\beta\alpha}|^2 \quad (\beta \neq \alpha) \tag{6-135}$$

$T$- 矩阵表示散射矩阵中发生了变化的部分，不发生变化的部分所对应的单位矩阵已被减除。

3. 散射矩阵的微扰论展开

形式上，可以把散射算符 $S$ 表示为

$$\psi_{\text{int}}(\infty) = S\psi_{in}(-\infty) = U(\infty, -\infty)\psi_{\text{int}}(-\infty) \tag{6-136}$$

$$S = U(+\infty, -\infty) = \lim_{\substack{t_0 \to -\infty \\ t \to +\infty}} U(t, t_0) = \hat{T} \exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}t V_{in}(t)\right] \tag{6-137}$$

式中

$$V_{in}(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0 t/h} V \mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0 t/h}$$

把式 (6-123) 代入式 (6-137)，得

$$S = \sum_{n=0}^{\infty} S^{(n)}$$

$$S^{(n)} = \left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\right)^n \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}t_1 \int_{-\infty}^{t_1} \mathrm{d}t_2 \cdots \int_{-\infty}^{t_{n-1}} \mathrm{d}t_n V_{in}(t_1) V_{in}(t_2) \cdots V_{in}(t_n) \tag{6-138}$$

在 $\hat{H}_0$ 表象中表示出来，即

$$S_{\beta\alpha} = \sum_{n=0}^{\infty} S_{\beta\alpha}^{(n)} \tag{6-139}$$

下面按微扰论精神逐级求出散射矩阵。

① 零级近似，显然 $S^{(0)} = 1$, 即

$$S_{\beta\alpha}^{(0)} = \langle \varphi_\beta | \varphi_\alpha \rangle = \delta_{\beta\alpha}$$

② 一级近似，由式 (6-138) 和式 (6-114)，可得

$$S_{\beta\alpha}^{(1)} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}t \exp[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(E_\beta - E_\alpha)t] \langle \beta | V | \alpha \rangle = \left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\right) 2\pi\hbar\delta(E_\beta - E_\alpha) \langle \beta | V | \alpha \rangle$$

③ 二级近似，

$$\begin{aligned} S_{\beta\alpha}^{(2)} &= \left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\right)^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}t_1 \int_{-\infty}^{t_1} \mathrm{d}t_2 \langle \beta | V_{in}(t_1) V_{in}(t_2) | \alpha \rangle \\ &= \left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\right)^2 \sum_r \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}t_1 \int_{-\infty}^{t_1} \mathrm{d}t_2 \langle \beta | V_{in}(t_1) | \gamma \rangle \langle \gamma | V_{in}(t_2) | \alpha \rangle \end{aligned}$$

其中 $\int_{-\infty}^{t_1} \mathrm{d}t_2 \langle \gamma | V(t_2) | \alpha \rangle$ 可以表示为

$$\int_{-\infty}^{t_1} \mathrm{d}t_2 \exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(E_\gamma - E_\alpha)t_2 - \varepsilon|t_2|/\hbar\right] \langle \gamma | V | \alpha \rangle$$

$$= \frac{\hbar \exp\left[\mathrm{i}(E_\gamma - E_\alpha)t_1/\hbar\right]}{\mathrm{i}(E_\gamma - E_\alpha - \mathrm{i}\varepsilon)} \langle\gamma|V|\alpha\rangle$$

$$S^{(2)}_{\beta\alpha} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_\gamma \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}t_1 \exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(E_\beta - E_\gamma)t_1\right] \times \frac{\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(E_\gamma - E_\alpha)t_1\right]}{E_\gamma - E_\alpha - \mathrm{i}\varepsilon}\langle\beta|V|\gamma\rangle\langle\gamma|V|\alpha\rangle$$

$$= \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_\gamma \frac{1}{E_\gamma - E_\alpha - \mathrm{i}\varepsilon}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}t_1 \times \exp[\mathrm{i}(E_\beta - E_\alpha)t_1/\hbar]\langle\beta|V|\gamma\rangle\langle\gamma|V|\alpha\rangle$$

$$= \mathrm{i}\sum_\gamma \frac{1}{E_\gamma - E_\alpha - \mathrm{i}\varepsilon}\langle\beta|V|\gamma\rangle\langle\gamma|V|\alpha\rangle 2\pi\delta(E_\beta - E_\alpha)$$

# 参 考 文 献


[1] Newton R G. Scatering Theory of Waves and Particles. New York: McGraw-Hill, 1966.

[2] Joachain C J. Quantum Collision Theory. Publising Company, 1975.

[3] 徐躬耦，王顺金. 原子核理论: 核反应. 北京：高等教育出版社，1992.

[4] Glendenning N K. Direct Nuclear Reactions. New York:Academic Press, 1983.

[5] Hodgson P E. The Optical Model of Elastic Scatering. New York: Oxford University Press, 1963.

[6] Geramb H V V. Microscopic Optical Potential. New York: Springer Verlag, 1979.

[7] Bjorken J, Dand Drell S D. Relativistic Quantum Fields. New York: McGraw-Hill, 1964, 1965.

[8] Itzykson C, Zuber J B. Quantum Field Theory. New York:McGraw-Hill, 1980.

# 第 7 章　相对论性量子力学

## 7.1　微观粒子的相对论性动力学

前面各章介绍的内容属于非相对论性量子力学, 本章则介绍相对论性量子力学的基本内容[1,2]。虽然二者都是量子论, 都研究微观粒子的量子运动的动力学, 即微观粒子在真空背景的量子涨落的影响下的动力学规律, 但是，由于相对论深刻地揭示了平稳真空背景时空的尺钟效应, 这使得相对论性量子力学, 特别是相对论性量子场论, 既包括了平稳真空背景时空的尺钟效应, 又包括了涨落真空背景的量子效应, 而非相对论性量子力学却只包括了真空背景的量子涨落效应。因此，相对论性量子力学和量子场论更深刻、更全面地刻画了真空背景两个方面的物理效应 (尺钟效应和涨落效应) 对微观粒子动力学的影响。

### 7.1.1　非相对论性量子力学的特点

1. 时空和能量–动量色散关系的不对称性

微观粒子的动力学是量子力学。前面介绍的量子力学是建立在非相对论时空和非相对论运动学的基础之上的，称为非相对论量子力学。非相对论时空是伽利略时空，其特点是空间与时间分离，从伽利略变换可以清楚看出，时间和空间处于不同地位，因而造成不对称性。由此，造就了非相对论运动学的特点，是自由粒子的能量–动量 $E$-$p$色散关系

$$E(p) = \frac{p^2}{2m} \tag{7-1}$$

表现出$E$-$p$ 的不对称性(能量一次方与动量二次方相对应的不对称性)。

2. 力学量对应算符恢复了对称性

但是，非相对论量子力学揭示出量子论最基本的特点与规律，即基本力学量能量 $E$ 和动量 $\vec{p}$ 与算符的对应关系：

$$E \to \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t} \tag{7-2a}$$

$$\vec{p} \to -\mathrm{i}\hbar\vec{\nabla} \tag{7-2b}$$

从上述基本力学与算符的对应关系可以看出，在经典力学水平上，非相对论时空的不对称性造成的运动学上能量 $E$ 与动量 $p$ 之间的不对称性，在量子力学的运动

学 (量子化) 的层次上得到了恢复。上述$(E,p)$ 与$\left(\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial t},-\mathrm{i}\hbar\vec{\nabla}\right)$的对应表现出时空与基本力学量算符之间的对称性。然而, 由于非相对论量子力学基于非相对论经典力学的对应原理, 非相对论经典力学的 $E$-$p$ 色散关系的不对称性，使得它对应的量子动力学方程 ——Schroedinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U\right)\psi \tag{7-3}$$

是时间的一次、坐标的二次偏微分方程，不具有相对论协变性 (时空对称性)，因而不是微观粒子的相对论性量子力学运动方程，只能是其非相对论极限。

总之，非相对论性量子力学的量子化条件 (能量 - 动量的算符对应关系) 是时空对称的，但能量 - 动量的色散关系却是时空不对称的。由于能量对应的 Hamilton 量决定量子动力学，因此，非相对论能量 - 动量的色散关系的时空不对称性，造成基于它的非相对论量子动力学方程的时空不对称性。

从更深层次分析，能量 - 动量的色散关系的形式与时空背景即真空背景的属性有关：伽利略–Newton 时空对应的真空背景是空虚无物的，而 Lorentz–Einstein 时空对应的真空背景却是充满真空背景物质的，这就导致两种不同的时空背景的尺钟效应、不同的能量 - 动量色散关系和不同的动力学的时空对称性*。

### 7.1.2 相对论性量子力学的特点

1. 时空和 $E$-$p$ 色散关系的对称性

相对论量子力学的第一个特点是时空背景是时空对称的 Lorentz 时空，相应的自由粒子的运动学关系 —— 能量与动量的关系是时空对称的, 基于 $E$-$p$ 色散关系建立的动力学方程自然是 Lorentz 协变的。

2. 相对论性量子理论的本质是粒子数可变的多粒子体系的量子理论

非相对论性量子多体理论，虽然引进了粒子的量子态的产生、消灭算符和二次量子化表象，但它们描述的是粒子从一个量子态向另一个量子态的跃迁与转变，并没有真正涉及粒子从真空中产生和湮灭。因此, 非相对论性量子多体理论处理的问题是粒子数不变的问题。而且, 按照非相对论性量子力学，可以以任意精度把一个粒子定域在时间或空间一个点上，只要与其共轭的量满足测不准关系

$$\Delta t\geqslant\hbar/\Delta E,\quad \Delta\vec{r}\geqslant\hbar/\Delta\vec{p} \tag{7-4}$$

在相对论的情形，这样做不可能保持粒子数不变。一旦 $\Delta E$ 超过粒子的静止质量对应的能量，粒子在能量和动量上的不确定性必然导致粒子从真空中产生；一

*：S.J. Wang arXiv:qr-qc 10701155, On the super-flnid property of the relativistic physical vacuum medium and the inertial motion of particles.

个粒子在时空上的定域必然导致在它附近从真空中产生出众多的粒子，因而形成一个由粒子–反粒子组成的量子场。因此, 在相对论框架内，一个粒子的量子理论由于真空背景的量子涨落必须代之以众多粒子的量子场论, 粒子数固定的理论必须代之以粒子数可变的理论。

因此，相对论性量子力学的第二个特点是粒子在时空上的定域造成的能量、动量的量子涨落必然导致粒子对在真空背景中的产生与湮没，一个粒子在时空上的定域必然伴随着其附近众多粒子的量子场的形成。因此，相对论性量子力学在本质上是量子场论。

把上述讨论深入一步，又会涉及物理时空的真空背景的属性问题。对于非相对论性量子力学，由于其 Galieo–Newton 时空的真空背景空虚无物，不仅使时间和空间以及能量–动量色散关系不对称，而且也无法讨论粒子从真空中产生与湮没，而反映量子涨落的测不准关系中量子涨落能量–动量的来源也无法说明。因此，基于空虚无物的 Galieo–Newton 时空背景的非相对论量子力学理论是不自洽的和有缺陷的。相反，充满背景物质的 Lorentz–Einstein 时空背景，不仅使时空的地位以及能量–动量色散关系，成为时空对称的，而且时空背景的尺钟效应、量子涨落的能量–动量来源，以及粒子从真空中的产生和湮灭，都成为有源之水和有本之木了。因此，基于 Lorentz–Einstein 时空背景的相对论性量子力学和量子场论理论是自持的和自洽的*。

## 7.2 Klein-Gordon 方程

### 7.2.1 Schroedinger 方程的建立

Schroedinger 方程是把非相对论性能量–动量关系算符化后得到的波动方程

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(r) \tag{7-5a}$$

$$E \to \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}, \vec{p} \to -i\hbar\vec{\nabla} \tag{7-5b}$$

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[\frac{\hbar^2}{2m}(-\mathrm{i}\vec{\nabla})^2 + V(r)\right]\Psi \tag{7-5c}$$

因此，它是非相对论性的，时–空坐标是不对称的，但它保持能量、质量 (概率) 守恒, 由它可得保持概率守恒的连续性方程

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla}\cdot\vec{j} = 0 \tag{7-6a}$$

* S.J. Wang arXiv:qr-qc 10701155, On the super-flnid property of the relativistic physical vacuum medium and the inertial motion of particles.

$$\rho = \psi^*(1)\psi(1) \tag{7-6b}$$

$$\vec{j} = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) \tag{7-6c}$$

### 7.2.2 相对论性量子力学方程——Klein-Gordon 的建立

把自由粒子的相对论性能量–动量色散关系

$$E^2 = c^2p^2 + m^2c^4 \tag{7-7a}$$

按式 (7-5b) 算符化, 得到相对论性协变的波动方程

$$(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial \mathrm{t}})^2\psi = [c^2(-\mathrm{i}\hbar\vec{\nabla})^2 + m^2c^4]\psi \tag{7-7b}$$

式 (7-7b) 称为 Klein-Gordon(K-G) 方程[1,2]。但是, 由它得到的几率守恒的连续性方程为

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \vec{\nabla}\cdot\vec{j} = 0 \tag{7-8a}$$

而

$$\rho = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2mc^2}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} - \psi\frac{\partial}{\partial t}\psi^*\right) \tag{7-8b}$$

$$\vec{j} = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{m}(\psi^*\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*) \tag{7-8c}$$

由于 K-G 方程是时间的二阶微分方程，初始条件 $\psi(x,t_0)$ 和 $\left.\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}\right|_{t_0}$ 的选取是独立的, 这导致按式 (7-8b) 计算的几率密度 $\rho$ 可能变成不合理、非物理的负值，这是 K-G 方程的第一困难：负几率问题。

K-G 方程的第二个困难是负能量问题。把自由粒子的运动方程的解 $\psi(r,t) \sim \mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}/\hbar}$ 代入 K-G 方程，得到能量平方关系及负能量

$$E^2 = c^2p^2 + m^2c^4$$

$$E = \pm\sqrt{c^2p^2 + m^2c^4} \tag{7-9}$$

即K-G 方程可能有负能解(从数学上说，必须有负能解，解组成的 Hilbert 空间才是完备的)。

分析表明，上述两个困难都与 K-G 方程是时间的二阶微分方程有关。因此，K-G 方程不能作为单粒子的相对论性量子力学方程；寻找物理上合理的单粒子的相对论性量子力学方程，必须消除造成 K-G 方程的困难的原因，即必须把方程对时间的微分线性化，有两条路可走。

(1) 作变换 $\psi(r,t) = \varPsi(r,t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}mc^2t/\hbar}$, 代入 K-G 方程, 考虑到 $\frac{\partial^2\varPsi}{\partial t^2} \approx E_{动能}\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\varPsi}{\partial t}$,

$$\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi(r,t) \to \left(E_{动能}\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\varPsi}{\partial t} + m^2c^4\varPsi + 2mc^2\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\varPsi}{\partial t}\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}mc^2t/\hbar} \tag{7-10}$$

在非相对论情况，由于 $mc^2 \gg E_{动能}$，略去包含动能系数的项，就得时间一阶的 $\Psi(\vec{r},t)$ 的波动方程，正好是 Schroedinger 方程。显然，这并没有解决问题，只是回到了非相对论性的结果。

(2) 大胆采取新颖的数学工具把 K-G 方程严格线性化 (而不进行非相对论近似)，这就是 Dirac 所走的创新路线 [1,2]。

## 7.3 自由粒子的 Dirac 方程

### 7.3.1 线性化

寻找自洽而合理的自由粒子的相对论性量子力学方程，归结为把时间的二阶的 K-G 方程线性化为时间的一阶的偏微分方程，而且要保证：①几率正定 $\rho \geqslant 0$；②方程具有 Lorentz 协变性。

K-G 方程的线性化归结为相对性能量

$$E^2 = c^2p^2 + m^2c^4 \tag{7-11a}$$

或其对应的算子

$$\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)^2 - c^2(-\mathrm{i}\hbar\vec{\nabla}^2) - m^2c^4 \tag{7-11b}$$

的线性化。这是通常的运算不能完成的，必须引进新的算子。设

$$E = c\vec{\alpha}\cdot\vec{p} + mc^2\beta \text{ 或 } \quad \hat{H} = c\vec{\alpha}\cdot\hat{\vec{p}} + mc^2\beta, \quad \vec{\alpha} = \{\alpha_i\} \tag{7-12}$$

对式 (7-12) 平方

$$\begin{aligned} E^2 &= c^2(\vec{\alpha}\cdot\vec{p})^2 + m^2c^4\beta^2 + c^3m\sum_i(\beta\alpha_i + \alpha_i\beta)p_i \\ &= c^2\frac{1}{2}\sum_{ij}(\alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i)p_ip_j + m^2c^4\beta^2 + c^3m\sum_i(\beta\alpha_i + \alpha_i\beta)p_i \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{H}^2 &= c^2(\vec{\alpha}\cdot\hat{\vec{p}})^2 + m^2c^4\beta^2 + c^3m\sum_i(\beta\alpha_i + \alpha_i\beta)\hat{p}_i \\ &= c^2\frac{1}{2}\sum_{ij}(\alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i)\hat{p}_i\hat{p}_j + m^2c^4\beta^2 + c^3m\sum_i(\beta\alpha_i + \alpha_i\beta)\hat{p}_i \end{aligned}$$

若 $\alpha_i, \beta$满足下列关系

$$\alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i = 2\delta_{ij}, \quad \beta\alpha_i + \alpha_i\beta = 0 \tag{7-13a}$$

$$\beta^2 = 1 \tag{7-13b}$$

则

$$E^2 = c^2p^2 + m^2c^4, \quad \hat{H}^2 = c^2\hat{\vec{p}}^{\,2} + m^2c^4$$

K-G 方程就线性化为 Dirac 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi = (c\vec{\alpha}\cdot\hat{\vec{p}} + mc^2\beta)\psi \tag{7-14}$$

在 $\hat{H}, \alpha_i, \beta$ 为Hermite 的条件下得连续性方程

$$\alpha^+ = \alpha, \quad \beta^+ = \beta, H^+ = H \to \frac{\partial\rho}{\partial t} + \vec{\nabla}\cdot j = 0 \tag{7-15a}$$

$$\rho = \psi^+\psi \tag{7-15b}$$

$$\vec{j} = \psi^+ c\vec{\alpha}\psi \tag{7-15c}$$

即几率守恒要求$\hat{H}, \alpha_i, \beta$为 Hermite 算子。

$\vec{j}$ 的表达式 (7-15c) 表明$c\vec{\alpha}$具有速度算子的性质。事实上，由于

$$[\hat{p}, \hat{H}] = 0$$

知 $\hat{\vec{p}}$ 守恒，由速度算子满足的 Heisenbeng 方程

$$\frac{\mathrm{d}\hat{x}_i}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\hat{x}_i, \hat{H}\right] = c\alpha_i(\neq \frac{\hat{p}_i}{m}) \tag{7-16}$$

式 (7-16) 证明 $c\vec{\alpha}$ 等于速度算子 $\frac{\mathrm{d}\hat{x}_i}{\mathrm{d}t}$。(注意：$\hat{\vec{p}}$ 作用于外部坐标空间，而 $\alpha_i, \beta$ 为矩阵，作用于内部自由度空间)。

请注意，①引进内部自由度空间的算子 $\alpha_i, \beta$，把 K-G 方程线性化为 Dirac 方程，不直接出现对经典能量平方 $E^2$ 开方时的 $-E$(负能量) 问题，下面将看到，在 Dirac 算子线性化方案中，这一问题转化为内部空间的新自由度 (自旋自由度以外的正反粒子自由度) 导致的解的加倍问题；②经典能量平方 $E^2$ 开方的能量线性化只揭示了相对论动力学中正负能量自由度的存在，而对应的量子 Hamilton 能量算子平方的线性化，却揭示了内部空间的全部自由度 (自旋自由度和正反粒子自由度)，Dirac 算子线性化方案揭示了微观粒子的内禀属性[3]。

### 7.3.2　$\alpha_i, \beta$ 的表示

考虑 $\alpha_i, \beta$ 的矩阵表示。一般地, 设 $\alpha_i, \beta$ 为 $N\times N$ 矩阵。由式 (7-13a)

$$\beta\alpha_i = -\alpha_i\beta \tag{7-17a}$$

有

$$\det(\beta\alpha_i) = \det\beta\det\alpha_i$$

$$= \det(-\alpha_i\beta) = (-1)^N \det\alpha_i \det\beta$$

$$(-1)^N = 1 \tag{7-17b}$$

故$N$ 必为偶数。下面从低阶到高阶逐级考虑。

(1) $N=2$：2×2 矩阵只有 4 个独立的基，可选为 $\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z,I$，任何 2×2 矩阵均可表示为它们的线性组合。显然

$$\sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = 2\delta_{ij} \tag{7-18a}$$

但是, $I$ 与 $\sigma_i$ 对易

$$I\sigma_i - \sigma_i I = 0 \tag{7-18b}$$

故

$$\beta \neq I \tag{7-18c}$$

因此, $\alpha_i,\beta$ 不可能为 2×2 矩阵，至少应为 4×4 矩阵。

(2) $N=4$：其表示有多种，其间差一个幺正变换。现取 Pauli-Dirac 表示

$$\beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, \quad \vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \quad I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{7-19a}$$

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{7-19b}$$

易证

$$\alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i = \begin{pmatrix} \sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i & 0 \\ 0 & \sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i \end{pmatrix} = 2\delta_{ij}\begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix} = 2\delta_{ij}$$

$$\beta\alpha_i + \alpha_i\beta = 0 \tag{7-20}$$

令

$$\gamma_k = -i\beta\alpha_k, \quad \gamma_4 = \beta \tag{7-21}$$

得

$$\gamma_\mu\gamma_\nu + \gamma_\nu\gamma_\mu = 2\delta_{\mu\nu}, \quad \gamma_\mu^+ = \gamma_\mu \quad (\mu = 1,2,3,4) \tag{7-22}$$

Dirac 方程化为 $(c=1, \hbar=1)$

$$\left(\gamma_\mu \frac{\partial}{\partial x_\mu} + m\right)\psi = 0 \tag{7-23}$$

因为 $\gamma_\mu$ 为 4×4 矩阵，$\psi$ 必为 4 分量列矢量–旋量

$$\psi(x)=\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} \tag{7-24}$$

表明内部自由度空间是四维的。

### 7.3.3 Lorentz 协变性

在 Lorentz 变换下 $\psi(x)$ 的列矢分量和分量函数中的变量均发生变化

$$\psi(x)\to\psi'(x')=\Lambda\psi(x),\quad \psi(x)=\Lambda^{-1}\psi'(x') \tag{7-25}$$

其中 $\psi'$ 对 $\psi$ 而言表示旋量分量函数形式的变化, 需要引进新的、内部空间的 4×4 变换矩阵 $\Lambda$ 来实现。$x'_\nu$ 对 $x_\nu$ 而言表示坐标变换, 由外部空间的 Lorentz 坐标变换 $(a_{\mu\nu})$ 来实现

$$x_\nu\to x'_\nu=a_{\nu\mu}x_\mu,\quad \frac{\partial}{\partial x_\mu}=\frac{\partial x'_\nu}{\partial x_\mu}\frac{\partial}{\partial x'_\nu}=a_{\nu\mu}\frac{\partial}{\partial x'_\nu} \tag{7-26}$$

内部空间的旋量的分量变换和外部空间函数的坐标变量变换一起造成方程形式的变换为

$$\left(\gamma_\mu a_{\nu\mu}\frac{\partial}{\partial x'_\nu}+m\right)\Lambda^{-1}\psi'(x')=0,$$

$$\left(\Lambda\gamma_\mu\Lambda^{-1}a_{\nu\mu}\frac{\partial}{\partial x'_\nu}+m\right)\psi'(x')=0 \tag{7-27}$$

若 $\gamma_\mu$- 矩阵在内部空间的变换满足 Lorentz 矢量变换规则

$$\Lambda\gamma_\mu\Lambda^{-1}=a_{\lambda\mu}\gamma_\lambda \tag{7-28}$$

由正交性条件 $a_{\lambda\mu}a_{\nu\mu}=\delta_{\lambda\nu}$，得到在新的 Lorentz 坐标系中的 Dirac 方程

$$\left(\gamma_\nu\frac{\partial}{\partial x'_\nu}+m\right)\psi'(x')=0 \tag{7-29}$$

与原来坐标系中的方程 (7-23) 比较可知, 变换后的旋量波函数 $\psi'(x')$ 在新的 Lorentz 坐标系中服从同一形式的 Dirac 方程，这叫做Dirac 方程对 Lorentz 变换协变。值得注意的是，Dirac 方程中的算子 $\gamma_\mu\dfrac{\partial}{\partial x_\mu}$ 在进行的内部空间和外部空间的联合的 Lorentz 变换时，保持 Dirac 矩阵 $\gamma_\mu$ 在任何 Lorentz 坐标系中不变。

$\gamma_\mu$ 的变换性质和 $\Lambda$ 的形式：现在由 $\gamma_\mu$ 的变换性质来计算 $\Lambda$ 的具体形式。

① 表示空间反射的$\varLambda$:　由

$$a_{ij}=-\delta_{ij},a_{4\mu}=a_{\mu4}=\delta_{4\mu},\quad x_4'=x_4,x_i'=-x_i$$
$$\varLambda\gamma_i\varLambda^{-1}=a_{\mu,i}\gamma_\mu=-\gamma_i,\varLambda\gamma_4\varLambda^{-1}=a_{\mu4}\gamma_\mu=\gamma_4 \tag{7-30a}$$

求得

$$\varLambda=-i\gamma_4,\varLambda^{-1}=i\gamma_4 \tag{7-30b}$$

② 表示时间反演的$\varLambda$：由

$$a_{ij}=\delta_{ij},a_{4\mu}=a_{\mu4}=-\delta_{4\mu},\quad x_4'=-x_4,x_i'=x_i \tag{7-31a}$$

$$\varLambda\gamma_i\varLambda^{-1}=a_{\mu,i}\gamma_\mu=\gamma_i,\quad \varLambda\gamma_4\varLambda^{-1}=a_{\mu4}\gamma_\mu=-\gamma_4 \tag{7-31b}$$

求得

$$\varLambda=\gamma_1\gamma_2\gamma_3,\varLambda^{-1}=\gamma_3\gamma_2\gamma_1 \tag{7-32}$$

③ 表示真 Lorentz 变换的$\varLambda$：

真 Lorentz 变换要求坐标变换行列式 $\det(a_{\mu\nu})=+1$。真 Lorentz 变换下的 $\varLambda$ 的具体形式可以从 $\gamma_\lambda$ 的变换性质得到。先考虑无穷小坐标变换

$$a_{\mu\nu}=\delta_{\mu\nu}+\varepsilon_{\mu\nu},\varepsilon_{\mu\nu}=-\varepsilon_{\nu\mu} \tag{7-33}$$

设相应的无穷小 $\varLambda$ 变换为

$$\varLambda=I+\frac{\mathrm{i}}{4}\varepsilon_{\mu\nu}\sigma_{\mu\nu},\varLambda^{-1}=I-\frac{\mathrm{i}}{4}\varepsilon_{\mu\nu}\sigma_{\mu\nu} \tag{7-34a}$$

$$\sigma_{\mu\nu}=-\frac{\mathrm{i}}{2}(\gamma_\mu\gamma_\nu-\gamma_\nu\gamma_\mu)=\sigma_{\mu\nu}^+ \tag{7-34b}$$

易证

$$\mathrm{i}[\sigma_{\mu\nu},\gamma_\lambda]=[\gamma_\mu\gamma_\nu,\gamma_\lambda]=\gamma_\mu\{\gamma_\nu,\gamma_\lambda\}-\{\gamma_\mu,\gamma_\lambda\}\gamma_\nu=2(\gamma_\mu\delta_{\nu\lambda}-\gamma_\nu\delta_{\mu\lambda}),$$

$$\begin{aligned}\varLambda\gamma_\lambda\varLambda^{-1}&=\gamma_\lambda+\frac{\mathrm{i}}{4}\varepsilon_{\mu\nu}[\sigma_{\mu\nu},\gamma_\lambda]=\gamma_\lambda+\frac{1}{2}\varepsilon_{\mu\nu}(\gamma_\mu\delta_{\nu\lambda}-\gamma_\nu\delta_{\mu\lambda})\\&=(\delta_{\mu\lambda}+\varepsilon_{\mu\lambda})\gamma_\mu=a_{\mu\lambda}\gamma_\lambda\end{aligned} \tag{7-35}$$

即 $\gamma_\lambda$ 和 $\varLambda$ 满足其变换性质 (7-28), 这表明式 (7-34) 的确是所需要的无穷小 $\varLambda$ 变换。有限的 $\varLambda$ 变换可以从对无穷小 $\varLambda$ 变换积分得到。

### 7.3.4　从角动量守恒导出 Dirac 粒子的内禀自旋为 1/2

下面证明，Dirac 方程必须引进粒子的内禀自旋为 1/2，才能满足角动量守恒的要求。由于

$$[\vec{l}, \hat{H}] = \mathrm{i}\hbar c\vec{\alpha} \times \vec{p} \neq 0$$

所以

$$\frac{\mathrm{d}\vec{l}}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\vec{l}, \hat{H}] = c\vec{\alpha} \times \vec{p} \neq 0 \tag{7-36}$$

式 (7-36) 表明轨道角动量 $\vec{l}$ 不守恒；但若假设粒子具有内禀自旋 $\vec{s} = \dfrac{1}{2}\sigma$，则总角动量 $\vec{j}$ 守恒，

$$\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}, \quad \vec{s} = \begin{pmatrix} \dfrac{\vec{\sigma}}{2} & 0 \\ 0 & \dfrac{\vec{\sigma}}{2} \end{pmatrix} \tag{7-37}$$

因为

$$[\vec{s}, \hat{H}] = -c\vec{\alpha} \times \vec{p}$$

由式 (7-36) 和式 (7-37) 可知

$$[\vec{j}, \hat{H}] = 0 \tag{7-38}$$

即总角动量 $\vec{j}$ 守恒。由于

$$\hat{s}^2 = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} \sigma^2 & 0 \\ 0 & \sigma^2 \end{pmatrix} = \frac{3}{4}\begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix} = \frac{3}{4}I = s(s+1)I \rightarrow s(s+1) = \frac{3}{4} \tag{7-39}$$

所以

$$s = \frac{1}{2}$$

即角动量守恒要求 Dirac 方程描述的粒子具有内禀自旋 $s$ =1/2。

### 7.3.5　中微子的运动方程

中微子质量为零，当 $m = 0$ 时，Dirac 方程不出现 $\beta$ 项，因此，$\alpha_i$ 有 2×2 表示，可以用 $\sigma_i$ 来实现。

$$\alpha_i = -\sigma_i, \quad (\sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i) = 2\delta_{ij} \tag{7-40}$$

这时，Dirac 方程变为二分量的方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = c\vec{\sigma} \cdot \vec{p}\psi = \hat{H}\psi \tag{7-41a}$$

$$\hat{H} = -c\vec{\sigma} \cdot \vec{p} \tag{7-41b}$$

显然

$$[\hat{p}, \hat{H}] = 0, \quad [\vec{\sigma} \cdot \vec{p}, \hat{H}] = 0 \quad , \quad [\hat{p}, \vec{\sigma} \cdot \vec{p}\,] = 0 \tag{7-42}$$

故动量 $\vec{p}$ 和螺旋性 $(\vec{\sigma} \cdot \vec{p}\,)/p$ 为互易的守恒量，它们的共同本征函数为 $\psi_{p\nu}$，满足

$$\hat{p}\psi_{p\nu}(r) = \vec{p}\psi_{p\nu}(r) \tag{7-43a}$$

$$\frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{p}\psi_{p\nu}(r) = \nu\psi_{p\nu} \tag{7-43b}$$

若选自旋沿 $\vec{p}$ 的投影即螺旋性算子的形式为 $(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})/p = \sigma_{||} = \sigma_z$，

$$\frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{p} = \sigma_{||} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{7-43c}$$

则 $\nu = \pm 1$，$\psi_{p\nu}$ 的显式为

$$\psi_{\vec{p}+}(\vec{r}) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}, \qquad \psi_{\vec{p}-}(\vec{r}) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \tag{7-44}$$

$$\sigma_{||}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = +1\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \sigma_{||}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -1\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{7-45}$$

$\psi_{p+}$ 表示自旋沿 $\vec{p}$ 的投影为 $+1/2$(螺旋性为 $+1$) 的状态，描述右旋反中微子；$\psi_{p-}$ 表示自旋沿 $\vec{p}$ 的投影为 $-1/2$(螺旋性为 $-1$) 的状态，描述左旋中微子。由于中微子 Hamilton 量正比于螺旋性：$\hat{H} = -c\vec{\sigma} \cdot \vec{p}$，右旋反中微子能量为负是因为它的螺旋性为正。因此，中微子能量正负问题来自螺旋性量子数。下面讲到，对于静止质量不为零的费米子，有类似的情况[3]。

在空间反射变换下

$$\begin{aligned} &\hat{\prod}\vec{P}\hat{\prod} = -\vec{P}, \quad \hat{\prod}\vec{\sigma}\hat{\prod} = \vec{\sigma} \\ &\hat{\prod}\hat{P} \cdot \vec{\sigma}\hat{\prod} = -\vec{P} \cdot \vec{\sigma} \\ &\hat{\prod}\hat{H}\hat{\prod} = -\hat{H} \end{aligned} \tag{7-46}$$

中微子的 Hamilton 量发生变化, 故其宇称不守恒。中微子虽然螺旋性守恒，但宇称不守恒，即螺旋性守恒与宇称守恒是不相容的。因此，凡中微子参与的过程 (弱作用过程) 宇称均不守恒, 这与其螺旋性守恒有关。

### 7.3.6 Dirac 方程的自由平面波解

自由 Dirac 粒子的 Hamilton 量 $\hat{H}$ 为[3]

$$\hat{H} = c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + mc^2\beta \tag{7-47}$$

$$\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix} = \vec{\sigma} \otimes \tau_1 \tag{7-48a}$$

$$\beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} = I \otimes \tau_3 \tag{7-48b}$$

此处引进新的算子 $\tau_i$(对应于粒子 - 反粒子自由度)

$$\tau_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \tau_2 = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \tau_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{7-49}$$

把 $\gamma_\mu$- 矩阵分裂为自旋空间算子 $(\sigma_i, I)$ 和粒子 - 反粒子空间算子 $(\tau_i, I)$ 后, Hamilton 量

$$\hat{H} = c\vec{p} \cdot \vec{\sigma} \otimes \tau_1 + mc^2 I \otimes \tau_3 \tag{7-50}$$

自由 Dirac 粒子的 Hamilton 量 $\hat{H}$具有明显的$\mathrm{su}_s(2) \otimes \mathrm{su}_\tau(2)$动力学对称群。上述两个 su(2) 代数的直积的约定是把自旋空间的算子 $(\sigma_i, I)$ 放在粒子 - 反粒子空间的算子 $(\tau_i, I)$ 的矩阵元中。

上述系统在普通空间和自旋空间的守恒量为

$$\vec{p} : [\hat{\vec{p}}, \hat{H}] = 0 \tag{7-51a}$$

$$\sigma_{||} = \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{p} : [\sigma_{||}, \hat{H}] = 0 \tag{7-51b}$$

设

$$\sigma_{||} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{7-52}$$

则 $\{\hat{\vec{p}}, \sigma_{||}\}$ 的共同本征函数可计算如下：

$$\psi_{\vec{p}\nu}(\vec{r}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} x_\nu(s) \quad (\nu = \pm 1) \tag{7-53}$$

$$x_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad x_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{7-54}$$

$$\hat{\vec{p}}\psi_{\vec{p}\nu} = \vec{p}\psi_{\vec{p}\nu} \tag{7-55a}$$

$$\sigma_{||}\psi_{\vec{p}\nu} = \nu\psi_{\vec{p}\nu} \quad (\nu = \pm 1) \tag{7-55b}$$

$\hat{H}$ 还有粒子–反粒子 $\tau$ -空间的自由度和相应的守恒量。因此, 总的本征函数应包括 $\vec{r}$ - 空间量子数 $\vec{p}$, $s$- 空间量子数 $\nu$ 和 $\tau$- 空间量子数 $\alpha$。故总的波函数为

$$\psi_{\vec{p}\nu\alpha}(\vec{r}, s, \tau) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} x_\nu(s)\tilde{v}_\alpha(\tau) \tag{7-56}$$

代入 Dirac 方程 $\hat{H}\psi = (c\vec{p}\cdot\vec{\sigma}\otimes\tau_1 + mc^2 I\otimes\tau_3)\psi = E\psi$ 后，得 $\tau$-空间的本征方程

$$\hat{H}_\tau \tilde{v}_\alpha = E_\alpha \tilde{v}_\alpha \tag{7-57}$$

$\tau$- 空间的 Hamilton 量为

$$\begin{aligned}\hat{H}_\tau &= \nu c p \tau_1 + mc^2\tau_3 = \begin{pmatrix} mc^2 & \nu\cdot cp \\ \nu\cdot cp & -mc^2 \end{pmatrix} \\ &= E\tilde{\tau}_3 = E\begin{pmatrix} \cos\dfrac{\theta}{2} & \nu\cdot\sin\dfrac{\theta}{2} \\ \nu\cdot\sin\dfrac{\theta}{2} & -\cos\dfrac{\theta}{2} \end{pmatrix}\end{aligned} \tag{7-58}$$

其中,

$$E = \sqrt{c^2p^2 + m^2c^4}, \quad \tilde{\tau}_3 = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\nu\theta\tau_2}\tau_3\mathrm{e}^{+\frac{\mathrm{i}}{2}\nu\theta\tau_2} \tag{7-59a}$$

$$\cos\theta = \frac{mc^2}{E}, \quad \sin\theta = \frac{cp}{E} \tag{7-59b}$$

先求 $\tau_3$ 的本征态 $v_\alpha$。因 $\tau_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$, 故其本征态 $v_\alpha$ 为

$$v_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad v_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{7-60a}$$

$$\tau_3 v_\alpha = \alpha v_\alpha \quad (\alpha = \pm 1) \tag{7-60b}$$

通过幺正变换可求得 $\tilde{\tau}_3$ 的本征解 $\tilde{v}_\alpha$：由式 (7-60b) 可得

$$\begin{aligned}&\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\theta}{2}\nu\tau_2}\tau_3\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\theta}{2}\nu\tau_2}\cdot\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\theta}{2}\nu\tau_2}v_\alpha = \alpha\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\theta}{2}\nu\tau_2}v_\alpha \\ &\tilde{\tau}_3\tilde{v}_\alpha = \alpha\tilde{v}_\alpha \quad (\alpha = \pm 1)\end{aligned} \tag{7-61a}$$

式中,

$$\tilde{v}_\alpha = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\theta}{2}\nu\tau_2}v_\alpha$$

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\theta}{2}\nu\tau_2} = \begin{pmatrix} \cos\dfrac{\theta}{2} & -\nu\cdot\sin\dfrac{\theta}{2} \\ +\nu\cdot\sin\dfrac{\theta}{2} & \cos\dfrac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

$$= \sqrt{\frac{E+mc^2}{2E}} \begin{pmatrix} 1 & -\dfrac{\nu cp}{E+mc^2} \\ +\dfrac{\nu cp}{E+mc^2} & 1 \end{pmatrix} \tag{7-61b}$$

$$\tilde{v}_+ = \sqrt{\frac{E+mc^2}{2E}} \begin{pmatrix} 1 \\ \dfrac{\nu cp}{E+mc^2} \end{pmatrix}, \quad \tilde{v}_- = \sqrt{\frac{E+mc^2}{2E}} \begin{pmatrix} \dfrac{-\nu cp}{E+mc^2} \\ 1 \end{pmatrix} \tag{7-61c}$$

在式 (7-61c) 中, 小分量与大分量之比 $\approx \dfrac{V}{c}$ $(p = mV)$。

易证

$$\hat{H}_\tau \tilde{v}_\alpha = \alpha E \tilde{v}_\alpha \quad (\alpha = \pm 1) \tag{7-62a}$$

即

$$\hat{H}_\tau \tilde{v}_+ = E\tilde{v}_+, \quad \hat{H}_\tau \tilde{v}_- = -E\tilde{v}_- \tag{7-62b}$$

正能态 $(\alpha = +1)$ 的解为

$$\psi_{\vec{p}\nu+} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar + i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} x_\nu(s)\tilde{v}_+(\tau) \tag{7-63}$$

按照算子直积规则，应把自旋波函数放到正反粒子波函数的列矢元素上, 因而有

$$\psi_{\vec{p}++} = \sqrt{\frac{E+mc^2}{2E}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \dfrac{cp}{E+mc^2} \\ 0 \end{pmatrix} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar + \mathrm{i}\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \tag{7-64a}$$

描述右旋电子，

$$\psi_{\vec{p}-+} = \sqrt{\frac{E+mc^2}{2E}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \dfrac{-cp}{E+mc^2} \end{pmatrix} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar + \mathrm{i}\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \tag{7-64b}$$

描述左旋电子。

负能态 $(\alpha = -1)$ 解为

$$\psi_{\vec{p}\nu-} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}Et/\hbar + i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} x_\nu(s)\tilde{v}_-(\tau) \tag{7-65}$$

$$\psi_{\vec{p}+-} = \sqrt{\frac{E+mc^2}{2E}} \begin{pmatrix} \dfrac{-cp}{E+m^2} \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \mathrm{e}^{\mathrm{i}Et/\hbar + \mathrm{i}\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \tag{7-66a}$$

描述右旋正电子，

$$\psi_{\vec{p}--}=\sqrt{\frac{E+mc^2}{2E}}\begin{pmatrix}0\\ \dfrac{cp}{E+mc^2}\\ 0\\ 1\end{pmatrix}\mathrm{e}^{\mathrm{i}Et/\hbar+\mathrm{i}\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \tag{7-66b}$$

描述左旋正电子。负能量的来源是 $\tau$-空间的自由度 $\tilde{\tau}_3$ 的量子数为 $-1$，因而对应于反粒子，而 $\hat{H}_\tau$ 在 $\tau$-空间有一个转动，把 $\tau$-空间的两个态混合起来了。因此，物理的正反粒子是 $\tau$ -空间正反粒子态的组合，这是粒子的静质量不为零的必然结果。Dirac 方程的正能解的 $\tilde{\tau}_3$ 的量子数为 $+1$，描述粒子 (电子)；而负能解 $\tilde{\tau}_3$ 的量子数为 $-1$，描述反粒子 (正电子)。因此，Dirac 方程预言了正电子 (反粒子) 的存在。

上述对自由粒子 Dirac 方程的处理的基本观点和物理根据是 $\gamma$-矩阵是 Dirac 粒子的两种内部自由度即自旋自由度 $(I_\sigma,\sigma_i)$ 和正-反粒子自由度 $(I_\tau,\tau_i\ )$ 按特定方式的相干组合, 以描述 Dirac 粒子在真空背景中的自由运动。当存在相互作用时, 自旋自由度和正反粒子自由度分别被独立地激发, 上述描述自由运动的四个相干组合的 $\gamma$-矩阵不再能描述这些激发和相应的相互作用, $\gamma$-矩阵包含的内部自由度必须分解成独立的自旋自由度 $(I_\sigma,\sigma_i)$ 和正-反粒子自由度 $(I_\tau,\tau_i\ )$，二者的直乘给出 16 个独立算子, 或等价地用同样具有 16 个元素的 $\gamma-$矩阵的非线性代数即 Clifford 代数 (Dirac 环) 才能描述这种相互作用。因此, $\gamma$-矩阵的这种分解所引进的正 -反粒子自由度 $(I_\tau,\tau_i\ )$ 对描述基本粒子的相互作用是必须的。引进正-反粒子自由度有以下结果: 对自由 Dirac 粒子, 平面波解有 5 个量子数而不是通常的 4 个量子数, 负能量来自正 - 反粒子量子数 $\tau_3=-1$。这一观点和相应的处理方式可以推广到中心力场的情况[3]。

## 7.4　电磁场中的 Dirac 方程

### 7.4.1　电磁场中电子的 Dirac 方程

自由电子的 Dirac 方程[1,2] 为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=H\psi \tag{7-67a}$$

$$H=c\alpha\cdot p+mc^2\beta=-\mathrm{i}\hbar c\alpha\cdot\nabla+mc^2\beta \tag{7-67b}$$

电子 (电荷为 $-$e) 在电磁势 $(\vec{A},\phi)$ 中的 Dirac 方程，可在方程 (7-67) 中进行如下

替换 (把普通微商替换为规范协变微商) 而得出

$$-\mathrm{i}\hbar\vec{\nabla} \to \left(-\mathrm{i}\hbar\vec{\nabla} + \frac{e}{c}\vec{A}\right) \quad = \left(\vec{P} + \frac{e}{c}\vec{A}\right) \quad \left(\hat{\vec{P}} = -\mathrm{i}\hbar\vec{\nabla}\right) \tag{7-68a}$$

$$\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial ct} \to \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial ct} + \frac{e}{c}\phi\right) \to \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t} \to \left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t} + e\phi\right) \tag{7-68b}$$

这时, 电磁场 $(\vec{A},\phi)$ 中电子的 Dirac 方程变为

$$\left[\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t} + e\phi - c\vec{\alpha}\cdot\left(\vec{P} + \frac{e}{c}\vec{A}\right) - mc^2\beta\right]\psi = 0 \tag{7-69}$$

或表示成

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = H\psi \tag{7-70a}$$

$$H = c\vec{\alpha}\cdot\left(\hat{\vec{P}} + \frac{e}{c}\vec{A}\right) - e\phi + mc^2\beta \tag{7-70b}$$

若 $(\vec{A},\phi)$ 与时间 $t$ 无关，则 $\psi$ 的定态解为

$$\psi(r,t) = \psi(r)\exp[-\mathrm{i}Et/\hbar] \tag{7-71}$$

四分量旋量波函数 $\psi(\vec{r})$ 满足定态 Dirac 方程

$$H\psi(r) = \left[c\vec{\alpha}\cdot(\hat{\vec{P}} + \frac{e}{c}\vec{A}) - e\phi + mc^2\beta\right]\psi(r) = E\psi(r) \tag{7-72}$$

### 7.4.2 非相对论极限与电子磁矩

把 $\psi(\vec{r})$ 写成大、小分量的形式, 并分解出与电子静止质量相应的能量所对应的高频因子

$$\psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}\exp[-\mathrm{i}mc^2t/\hbar] \tag{7-73}$$

其目的是把与电子静质量相应的能量剔除，以便于基于剩下的动能讨论非相对论极限。把式 (7-73) 代入方程 (7-70a)，得到大小分量的耦合方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi = c\vec{\sigma}\cdot(\vec{P} + \frac{e}{c}\vec{A})\chi - e\phi\varphi \tag{7-74a}$$

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\chi = c\vec{\sigma}\cdot(\vec{P} + \frac{e}{c}\vec{A})\varphi - e\phi\chi - 2mc^2\chi \tag{7-74b}$$

式 (7-74b) 中, 由于静止能量已分离出去，$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\chi$ 正比于动能乘以 $\chi$, 它和 $e\phi\chi$ 一样, 是 $2mc^2\chi$ 的高阶无穷小量。在非相对论极限下，这些小量可略去, 因而可得

$$\chi \approx \frac{1}{2mc}\vec{\sigma}\cdot\left(\hat{\vec{P}} + \frac{e}{c}\vec{A}\right)\varphi \tag{7-75}$$

由上式知 $\chi/\varphi \sim v/c \ll 1$，$\chi$ 为小分量。把式 (7-75) 代入式 (7-74a)，得大分量的方程,

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi = \frac{1}{2m}\left[\vec{\sigma}\cdot\left(\hat{\vec{P}}+\frac{e}{c}\vec{A}\right)\right]^2\varphi - e\phi\varphi \tag{7-76}$$

利用恒等式

$$\begin{aligned}\left[\vec{\sigma}\cdot\left(\hat{\vec{P}}+\frac{e}{c}\vec{A}\right)\right]^2 &= \sigma_i\sigma_j\left(\hat{P}_i+\frac{e}{c}A_i\right)\left(\hat{P}_j+\frac{e}{c}A_j\right)\\ &= \left(\hat{\vec{P}}+\frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 + \mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\sigma_k\left(\hat{P}_i+\frac{e}{c}A_i\right)\left(\hat{P}_j+\frac{e}{c}A_j\right)\\ &= \left(\hat{\vec{P}}+\frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 + \mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\sigma_k\frac{e}{c}\left(\hat{P}_iA_j\right) + \mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\sigma_k\frac{e}{c}\left(A_j\hat{P}_i + A_i\hat{P}_j\right)\\ &= \left(\hat{\vec{P}}+\frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 + \frac{e\hbar}{c}\vec{\sigma}\cdot\left(\vec{\nabla}\times\vec{A}\right)\\ &= \left(\hat{\vec{P}}+\frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 + \frac{e\hbar}{c}\vec{\sigma}\cdot\vec{B}\end{aligned} \tag{7-77}$$

式 (7-77) 推导中用到反对称张量 $\varepsilon_{ijk}$ 与二阶对称张量的收缩为零, 方程 (7-76) 可化为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi = \left[\frac{1}{2m}\left(\hat{\vec{P}}+\frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 + \frac{e\hbar}{2mc}\vec{\sigma}\cdot\vec{B} - e\phi\right]\varphi \tag{7-78}$$

式中，右边第二项为 $-\vec{\mu}\cdot\vec{B}$，其中

$$\vec{\mu} = -\frac{e\hbar}{2mc}\vec{\sigma} = -\frac{e}{mc}\vec{s} \tag{7-79}$$

表示电子内禀磁矩，$-\vec{\mu}\cdot\vec{B}$ 表示电子内禀磁矩与外磁场 $B$ 的相互作用能。电子内禀磁矩的值等于 Bohr 磁子

$$\mu = \mu_{\mathrm{B}} = \frac{e\hbar}{2mc} \tag{7-80}$$

这是从 Dirac 方程得出的一个重要结论。然而, 电子磁矩的观测值为

$$\mu = 1.00116\mu_{\mathrm{B}}$$

Dirac 的相对论波动方程一方面能够对观测到的电子磁矩给予较满意的说明，但另一方面观测值与 Bohr 磁子还有微小差异 ($\sim 10^{-3}$)，这一差异称为电子的反常磁矩。作为单电子理论的 Dirac 方程对此无法解释, 只有充分考虑了电子周围的真空的量子涨落和极化的量子电动力学, 才能对电子的反常磁矩作出满意的解释。

### 7.4.3 中心力场下的非相对论极限: 自旋轨道耦合力

考虑电子在中心力场中的运动，如电子在原子核的 Coulomb 吸引势场 $\phi(r)$ 中的运动。此时 $\vec{A}=0$，中心力场标量势为

$$V(r) = -e\phi(r) \tag{7-81}$$

定态 Dirac 方程 (7-72) 可表示为

$$[c\vec{\alpha}\cdot\vec{p}+mc^2\beta+V(r)]\psi=E\psi \quad (\vec{p}=-\mathrm{i}\hbar\vec{\nabla}) \tag{7-82}$$

为便于过渡到非相对论情况，把静能量分出来, 令

$$E=E'+mc^2 \tag{7-83}$$

(在非相对论近似下，$E'=E-mc^2\ll mc^2$)，并把 $\psi$ 表示成大、小分量

$$\psi=\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix} \tag{7-84}$$

采用 Pauli-Dirac 表象，式 (7-82) 化为大、小分量的耦合方程

$$c(\sigma\cdot p)\chi=(E'-V(r))\varphi \tag{7-85a}$$

$$c(\sigma\cdot p)\varphi=(2mc^2+E'-V(r))\chi \tag{7-85b}$$

由式 (7-85b) 可得

$$\chi=\frac{c\sigma\cdot p}{2mc^2+(E'-V)}\varphi=\frac{1}{2mc}\left(1+\frac{E'-V}{2mc^2}\right)^{-1}\sigma\cdot p\varphi$$

在非相对论极限下, 取上式按 $\dfrac{E'-V}{2mc^2}$ 展开的最低次项得到

$$\chi\approx\frac{1}{2mc}\left(1-\frac{E'-V}{2mc^2}\right)\sigma\cdot p\varphi \tag{7-86}$$

把式 (7-86) 代入式 (7-85a)，得到大分量波函数 $\varphi$ 满足的方程

$$\frac{1}{2m}\sigma\cdot p\left(1-\frac{E'-V}{2mc^2}\right)\sigma\cdot p\varphi=(E'-V)\varphi \tag{7-87a}$$

化简后得到

$$\left[\frac{1}{2m}p^2-\frac{p^2}{4m^2c^2}E'+\frac{1}{4m^2c^2}(\sigma\cdot p)V(r)(\sigma\cdot p)\right]\varphi=(E'-V)\varphi \tag{7-87b}$$

下面的推导要用到下面的用恒等式

$$\begin{aligned}
V(\sigma\cdot p)&=(\sigma\cdot p)V+\mathrm{i}\hbar\sigma\cdot\nabla V\\
(\sigma\cdot p)V(r)(\sigma\cdot p)&=(\sigma\cdot p)^2V+\mathrm{i}\hbar(\sigma\cdot p)(\sigma\cdot\nabla V)\\
&=p^2V+\mathrm{i}\hbar\{p\cdot(\nabla V)+\mathrm{i}\sigma\cdot[p\times\nabla V(r)]\}
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= p^2V + \mathrm{i}\hbar\{p\cdot(\nabla V) + \mathrm{i}\sigma\cdot[-\mathrm{i}\hbar(\nabla\times\nabla)V(r) - \nabla V\times p]\} \\
&= p^2V + \mathrm{i}\hbar\left\{(\nabla V)\cdot p - \mathrm{i}\hbar\nabla^2V - \mathrm{i}\left[\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\vec{\sigma}\cdot(\vec{r}\times\vec{p})\right]\right\} \\
&= p^2V + \hbar^2\left(\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\frac{\partial}{\partial r} + \nabla^2V\right) + \hbar\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}(\vec{\sigma}\cdot\vec{l})
\end{aligned} \tag{7-88}
$$

在式 (7-88) 的推导中用到 $(\nabla V)\cdot p = -\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\frac{\vec{r}\cdot\vec{\nabla}}{r} = -\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\frac{\partial}{\partial r}$。把式 (7-88) 代入式 (7-87) 得

$$
\begin{aligned}
&\left(\frac{p^2}{2m} + V - E'\right)\varphi + \frac{1}{4m^2c^2}p^2(V - E')\varphi \\
&+\frac{1}{4m^2c^2}\left[\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\hbar\sigma\cdot l + \hbar^2\nabla^2V + \hbar^2\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\frac{\partial}{\partial r}\right]\varphi = 0
\end{aligned} \tag{7-89}
$$

式中左边第二项与第三项均为相对论修正项。利用式 (7-86)，略去高级修正项后，可得 $(E' - V)\varphi \sim \frac{1}{2m}p^2\varphi$。于是式 (7-89) 左边第二项化为 $\frac{1}{8m^3c^2}p^4\varphi$，该方程可改写成

$$
\left\{\frac{p^2}{2m} + V - \frac{p^4}{8m^3c^2} + \frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}s\cdot l + \frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\left(\nabla^2V + \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\frac{\partial}{\partial r}\right)\right\}\varphi = E'\varphi \tag{7-90}
$$

方程 (7-90) 左边第三项 $-\frac{p^4}{8m^3c^2}$ 为动能的相对论修正，第四项为自旋–轨道耦合项 (Thomas 项)，可记为 $\xi(r)\vec{s}\cdot\vec{l}$，而

$$
\xi(r) = \frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \tag{7-91}
$$

式 (7-90) 左边最后两项无经典含义。还应指出，最后一项不是 Hermite 算符。问题出在：把 Dirac 波函数的大分量直接当成非相对论近似下的二分量波函数，导致了几率不守恒和随之而来的 $\hat{H}$ 的非 Hermite 性。挽救的办法是在取非相对论极限时要保证总几率守恒 (波函数归一化保持不变)，即要求几率守恒的波函数 $\varPsi$ 满足

$$
(\varPsi,\varPsi) = (\psi,\psi) = (\varphi,\varphi) + (\chi,\chi) \tag{7-92}
$$

在准确到 $O(v^2/c^2)$ 下，由式 (7-86) 得

$$
(\chi,\chi) \approx \left(\varphi, \left(\frac{\sigma\cdot p}{2mc}\right)^2\varphi\right) = \left(\varphi, \frac{p^2}{4m^2c^2}\varphi\right)
$$

所以

$$
(\psi,\psi) = \left(\varphi, \left(1 + \frac{p^2}{4m^2c^2}\right)\varphi\right) = (\varPsi,\varPsi) \tag{7-93}
$$

因而

$$\Psi \approx \left(1+\frac{p^2}{8m^2c^2}\right)\varphi \quad 或 \quad \varphi \approx \left(1-\frac{p^2}{8m^2c^2}\right)\Psi \tag{7-94}$$

把式 (7-94) 代入式 (7-90)，略去方程左边 $p^6$ 项以及自旋–轨道力和势场梯度项乘 $p^2$ 的项后，得出 $\Psi$ 满足的方程

$$\begin{aligned}&\left\{\frac{p^2}{2m}+V-\left(\frac{1}{8}+\frac{1}{16}\right)\frac{p^4}{m^3c^2}+\frac{(E'-V)}{8m^2c^2}p^2\right.\\&\left.+\frac{\hbar}{4m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\sigma\cdot l+\frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\left(\nabla^2V+\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\frac{\partial}{\partial r}\right)\right\}\Psi=E'\Psi\end{aligned} \tag{7-95}$$

利用

$$\begin{aligned}[V,p^2]&=[V,p]\cdot p+p\cdot[V,p]\\&=\mathrm{i}\hbar\nabla V\cdot p+\mathrm{i}\hbar p\cdot\nabla V=\hbar^2\nabla^2V+2\hbar^2\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\frac{\partial}{\partial r}=\left[O\left(\frac{v^4}{c^4}\right)-O\left(\frac{v^4}{c^4}\right)\right]\approx 0\end{aligned}$$

即

$$[Vp^2-p^2V]=\hbar^2\nabla^2V+2\hbar^2\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\frac{\partial}{\partial r}\approx 0 \tag{7-96}$$

把式 (7-96) 代入式 (7-95)，并利用 $E'-V\approx\dfrac{p^2}{2m}$ 和 $\dfrac{p^2}{8m^2c^2}(E'-V)\Psi\approx\dfrac{p^4}{16m^3c^2}\Psi$ 则式 (7-95) 化为

$$\left\{\frac{p^2}{2m}+V-\frac{p^4}{8m^3c^2}+\frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}s\cdot l+\frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\nabla^2V\right\}\Psi=E'\Psi \tag{7-97}$$

这就是在中心力场 $V(r)$ 中运动的粒子的 Dirac 方程的非相对论极限, 其左边的 Hamilton 量算是 Hermite 的。左边花括号 $\{\cdots\}$ 内的后三项为最低阶的相对论修正项 $[O(v^2/c^2)$ 项]，它们将导致能级的精细结构。

对于类氢原子，$V(r)=-Ze^2/r$，所以

$$\xi(r)=\frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}=\frac{Ze^2}{2m^2c^2r^3} \tag{7-98}$$

$$\frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\nabla^2V=\frac{-Z\hbar^2e^2}{8m^2c^2}\nabla^2\frac{1}{r}=\frac{\pi Z\hbar^2e^2}{2m^2c^2}\delta(r) \tag{7-99}$$

后一项 (Darwin 项) 包含 $\delta(r)$ 函数, 故称为接触势 (contact potential)。它只对 $S$ 态 ($l=0$) 有影响。与此相反，自旋轨道耦合势 $\xi(r)\vec{s}\cdot\vec{l}$，只对 $l\neq 0$ 的态有影响。

### 7.4.4 中心力场中电子运动的守恒量

1. 非相对论情况

在非相对论情况下，在中心力场 $V(r)$ 中运动的粒子的 Hamilton 量为

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\vec{l}^{\,2}}{2mr^2} + V(r) \tag{7-100}$$

容易证明

$$[\vec{l}, \hat{H}] = 0 \tag{7-101}$$

即轨道角动量 $\vec{l}$ 为守恒量，因而 $\vec{l}^{\,2}$ 也是守恒量。所以常选 $\{\hat{H}, \vec{l}^2, l_z\}$ 为守恒量完全集，它们的共同本征态记为 $\psi_{nlm}$。

对于电子，还需考虑自旋轨道耦合作用 $\xi(r)s\cdot l, \xi(r) = \dfrac{1}{2m^2c^2}\dfrac{1}{r}\dfrac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}$。此时，轨道角动量 $\vec{l}$ 与自旋 $\vec{s}$ 分别不再是守恒量，但总角动量 $\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$ 是守恒量，因为

$$[\vec{j}, \hat{H}] = 0, [\vec{j}, \vec{s}\cdot\vec{l}\,] = 0 \tag{7-102}$$

还可以证明

$$[\vec{l}^{\,2}, \vec{s}\cdot\vec{l}\,] = 0 \tag{7-103}$$

即 $\vec{l}^{\,2}$ 仍是守恒量，所以习惯选 $\{\hat{H}, \vec{l}^{\,2}, \vec{j}^2, j_z\}$ 为守恒量完全集，相应的本征函数记为 $\psi_{nljm_j}$。对于给定的 $j$, $l$ 可取 $l = j \pm 1/2$，而 $m_j = j, j-1, \cdots -j$，能级为 $(2j+1)$ 重简并。我们还注意到，在非相对论情况下，体系的宇称 $\pi = (-)^l$, 由角动量量子数 $l$ 的奇偶性完全确定。因此也可以选 $\{\hat{H}, \vec{j}^2, j_z, \Pi\}$ 为守恒量完全集，$\Pi$ 为空间反射算符，其本征值为 $\pi = \pm 1$。

2. 相对论情况

考虑电子在 Coulomb 势 $\phi(r)$ 中运动，令 $V(r) = -e\phi(r)$，则 Hamilton 量可表示为

$$\hat{H} = c\vec{\alpha}\cdot\vec{p} + mc^2\beta + V(r) \tag{7-104}$$

与自由电子情况相似，可证明

$$[\vec{l}, \hat{H}] = \mathrm{i}\hbar c\vec{\alpha}\times\vec{p} \neq 0 \tag{7-105}$$

即 $\vec{l}$ 不是守恒量。但

$$\vec{j} = \vec{l} + \frac{\hbar}{2}\vec{\Sigma}, \quad \vec{\Sigma} = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix} \tag{7-106}$$

是守恒量。与非相对论情况不同之处是：$\vec{l}^{\,2}$ 不再守恒，因为

$$[\vec{l}^{\,2},\hat{H}]=c[\vec{l}^{\,2},\vec{\alpha}\cdot\vec{p}\,]=c\vec{l}\cdot[\vec{l},(\vec{\alpha}\cdot\vec{p})\,]+c[\vec{l},(\vec{\alpha}\cdot\vec{p})]\cdot\vec{l}$$

$$=\mathrm{i}\hbar c\{\vec{l}\cdot(\vec{\alpha}\times\vec{p}\,)+(\vec{\alpha}\times\vec{p}\,)\cdot\vec{l}\,\}\neq 0 \tag{7-107}$$

另外，由于式 (7-106) 平方可得

$$\hbar\vec{\varSigma}\cdot\vec{l}=\vec{j}^{\,2}-\vec{l}^{\,2}-\frac{3}{4}\hbar^2 \tag{7-108}$$

$\vec{\varSigma}\cdot\vec{l}$ 也不再是守恒量，但可以证明, 与自旋 $\vec{\varSigma}$ 沿角动量 $\vec{l}$ 的投影 $\vec{\varSigma}\cdot\vec{l}$ 有关的量

$$\hbar\hat{K}=\beta(\vec{\varSigma}\cdot\vec{l}+\hbar) \tag{7-109}$$

是守恒量, 即

$$[\hat{K},\hat{H}]=0 \tag{7-110}$$

还可以证明

$$[\hat{K},\vec{j}]=0 \tag{7-111}$$

所以，代替非相对论情况下的守恒量完全集 $\{\hat{H},\vec{l}^{\,2},\vec{j}^2,j_z\}$，相对论情况下的守恒量完全集可以取为 $\{\hat{H},\hat{K},\vec{j}^2,j_z\}$。

$\hbar\hat{K}$ 的本征值可如下求出。利用 $[\beta,\vec{\varSigma}]=0,\beta^2=1$, 可得

$$\hbar^2\hat{K}^2=(\vec{\varSigma}\cdot\vec{l})^2+2\hbar\vec{\Sigma}\cdot\vec{l}+\hbar^2$$

但

$$(\vec{\varSigma}\cdot\vec{l})^{\,2}=\vec{l}^{\,2}+\mathrm{i}\vec{\varSigma}\cdot(\vec{l}\times\vec{l})=\vec{l}^2-\hbar\vec{\varSigma}\cdot\vec{l}$$

所以

$$\hbar^2\hat{K}^2=\vec{l}^{\,2}+\hbar\vec{\varSigma}\cdot\vec{l}+\hbar^2=\vec{j}^{\,2}+\frac{1}{4}\hbar^2 \tag{7-112}$$

可以看出，虽然 $\vec{l}^{\,2}$ 与 $\vec{\varSigma}\cdot\vec{l}$ 分别不再为守恒量，但它们的线性组合 $(\hbar\hat{K})^2$ 却是守恒量 (因 $\vec{j}^2$ 守恒)。把 $\vec{j}^2$ 的本征值代入式 (7-112)，可求出 $(\hbar\hat{K})^2$ 的本征值为

$$\left[j(j+1)+\frac{1}{4}\right]\hbar^2=(j+\frac{1}{2})^2\hbar^2 \tag{7-113}$$

所以 $\hat{K}$ 的本征值为

$$\pm\left(j+\frac{1}{2}\right)=\pm1,\pm2,\pm3,\cdots \tag{7-114}$$

对给定的 $j$, $\hat{K}$ 可以取两个值。$(\hbar\hat{K})^2$ 的角色与非相对论情形下的 $l^2$ 相当。$\hat{K}$ 的物理意义:

$\hat{H}^2 = m^2c^4 - (c\hbar)^2\nabla^2$ 在直角坐标系中线性化 $\hat{H} = c\vec{\alpha}\cdot\vec{p} + mc^2\beta$, 导致螺旋性算子 $\vec{\alpha}\cdot\vec{p} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma}\cdot\vec{p} \\ \vec{\sigma}\cdot\vec{p} & 0 \end{pmatrix}$ 的出现，它与自旋沿动量的投影 $\vec{\sigma}\cdot\vec{p}$ 有关;

$(\hat{H} - V_s)^2 = m^2c^4 - (c\hbar)^2\nabla^2$ ($V_s$ 是中心力标量势) 在球坐标系中线性化 $\hat{H} - V(r) = c\alpha_r\hat{p}_r + \dfrac{\mathrm{i}\hbar c}{r}\alpha_r\beta\hat{K} + mc^2\beta$, 导致 $\hbar\hat{K} = \beta(\vec{\Sigma}\cdot\vec{l} + \hbar)$ 算子的出现，它与自旋沿轨道角动量的投影 $\vec{\Sigma}\cdot\vec{l}$ 有关[3]。

因此，$\hat{K}$ 是直角坐标系中的螺旋性算子在球坐标系中的类比，前者度量自旋沿轨道角动量的投影 $\beta(I\vec{\sigma}\cdot\vec{l} + \hbar)$，其中 $\vec{\Sigma} = I\vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix}$, 后者度量自旋沿动量的投影 $(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})/p$。

### 7.4.5　$(\hat{K}, \vec{j}^2, j_z)$ 的共同本征态

先构造 $(j^2, j_z)$ 的共同本征态。把 $\phi_{jm_j} = \sum\limits_{mv}\langle jmj|lmsv\rangle Y_{lm}X_{sv}$ 的展开式的两项写成列矢形式为

$$\phi^A_{jm_j} = \frac{1}{\sqrt{2l+1}}\begin{pmatrix} \sqrt{l+m+1} & Y_{lm} \\ \sqrt{l-m} & Y_{lm+1} \end{pmatrix}, \quad l = j - 1/2 \tag{7-115}$$

$$\phi^B_{jm_j} = \frac{1}{\sqrt{2l+3}}\begin{pmatrix} -\sqrt{l+1-m} & Y_{l+1m} \\ \sqrt{l+1+m+1} & Y_{l+1m+1} \end{pmatrix}, \quad l+1 = j + 1/2 \tag{7-116}$$

式中两个 $\phi^{A,B}_{jm_j}$ 的球谐函数的轨道角动量差 1, 体现了自旋–轨道角动量耦合成同一 $j$ 的两种方式 $\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$, 轨道角动量差 1 使两者的宇称相反。$\phi^A$ 与 $\phi^B$ 有相同的 $(\vec{j}^2, j_z)$ 本征值 $j(j+1)\hbar^2$ 和 $m_j = (m+1/2)\hbar$。两者有确定的宇称，但前者的宇称为 $\pi = (-)^l = (-)^{j-1/2}$ ，后者的宇称为 $\pi = (-)^{l+1} = (-)^{j+1/2}$。

再构造 $(\hat{K}, \vec{j}^2, j_z)$ 的共同本征态。利用

$$\hbar\vec{\sigma}\cdot\vec{l} = \vec{j}^{\,2} - \vec{l}^{\,2} - \frac{3}{4}\hbar^2 \tag{7-117}$$

容易得出

$$\vec{\sigma}\cdot\vec{l}\phi^A_{jm_j} = \left(j - \frac{1}{2}\right)\hbar\phi^A_{jm_j}$$

$$\vec{\sigma}\cdot\vec{l}\phi^B_{jm_j} = -\left(j + \frac{3}{2}\right)\hbar\phi^B_{jm_j} \tag{7-118}$$

即 $\phi^A$ 与 $\phi^B$ 均为 $\vec{\sigma}\cdot\vec{l}$ 的本征态。考虑到

$$\hbar\hat{K} = \begin{pmatrix} \vec{\sigma}\cdot\vec{l} + \hbar & 0 \\ 0 & -(\vec{\sigma}\cdot\vec{l} + \hbar) \end{pmatrix} \tag{7-119}$$

容易证明

$$\phi_1 = \begin{pmatrix} c_1\phi_{jm_j}^A \\ c_2\phi_{jm_j}^B \end{pmatrix}, \quad \phi_2 = \begin{pmatrix} c_1\phi_{jm_j}^B \\ c_2\phi_{jm_j}^A \end{pmatrix} \tag{7-120}$$

是 $\hat{K}$ 的本征态 ($c_1$, $c_2$ 是任意常系数)，

$$\hat{K}\phi_1 = \left(j+\frac{1}{2}\right)\phi_1, \hat{K}\phi_2 = -\left(j+\frac{1}{2}\right)\phi_2 \tag{7-121}$$

所以 $\phi_1$ 与 $\phi_2$ 都是 $(\hat{K}, \vec{j}^2, j_z)$ 的共同本征函数。$(\vec{j}^2, j_z)$ 的本征值分别为 $j(j+1)\hbar^2$ 和 $m_j = (m+1/2)\hbar$，但 $\hat{K}$ 的本征值对于 $\phi_1$ 与 $\phi_2$ 分别为 $\pm(j+1/2)$。值得注意的是，中心力场中 Dirac 粒子的总宇称，包括空间波函数的宇称 (外部宇称) 与内禀波函数的宇称 (内禀宇称)，在四分量波函数 $\phi_1$ 与 $\phi_2$ 中，包含着空间波函数宇称相反的两个二分量波函数 $\phi_{jm_j}^{A,B}$, 而这两个二分量波函数又代表正反粒子内禀态，其内禀宇称也相反, 内禀宇称正好与空间波函数的外部宇称匹配，给出具有确定总宇称的总波函数 $\phi_1$ 与 $\phi_2$[3]。

### 7.4.6　径向方程

从前面的讨论可知, 氢原子的 Dirac 方程的定态本征解，必须是守恒量完全集 $\{\hat{H}, \hat{K}, j^2, j_z\}$ 的共同本征态，波函数的角度与自旋部分应组合成为 $(\hat{K}, \vec{j}^2, j_z)$ 的本征函数，而径向本征解应由 Hamilton 量 $\hat{H}$ 确定。在 7.4.5 小节已得到 $(\hat{K}, \vec{j}^2, j_z)$ 的本征函数并由式 (7-120) 给出, 剩下的任务就是求解在一定边界条件下的径向方程组。为找出此径向方程组，先对 $\hat{H}$ 做一些变化，使之用守恒量 $\hat{K}$ 表示出来。在

$$\hat{H} = c\vec{\alpha}\cdot\vec{p} + mc^2\beta + V(r) \tag{7-122}$$

中，只有 $\vec{\alpha}\cdot\vec{p}$ 与 $\hat{K}$ 有关。为找出它们的关系，定义算符

$$\alpha_r = \vec{\alpha}\cdot\vec{r}/r \tag{7-123}$$

显然，$\alpha_r^2 = 1$，所以 $\alpha_r$ 的本征值为 $\pm1$。利用

$$\begin{aligned}\alpha_r(\vec{\alpha}\cdot\vec{p}) &= \frac{1}{r}(\vec{\alpha}\cdot\vec{r})(\vec{\alpha}\cdot\vec{p}) = \frac{1}{r}\{\vec{r}\cdot\vec{p} + \mathrm{i}\vec{\Sigma}\cdot(\vec{r}\times\vec{p})\} \\ &= -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\mathrm{i}}{r}\vec{\Sigma}\cdot\vec{l} = \hat{p}_r + \frac{\mathrm{i}\hbar}{r}\beta\hat{K}\end{aligned} \tag{7-124}$$

其中, 径向动量算符 $\hat{p}_r$(在径向积分测度 $r^2\mathrm{d}r$ 下) 是 Hermite 的，

$$\hat{p}_r = -\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right) = \hat{p}_r^+ \tag{7-125}$$

则有

$$\vec{\alpha}\cdot\vec{p}=\alpha_r^2(\vec{\alpha}\cdot\vec{p})=\alpha_r\left(\hat{p}_r+\frac{\mathrm{i}\hbar}{r}\beta\hat{K}\right) \tag{7-126}$$

因而

$$\hat{H}=c\alpha_r\hat{p}_r+\frac{\mathrm{i}\hbar c}{r}\alpha_r\beta\hat{K}+mc^2\beta+V(r) \tag{7-127}$$

由此可见，$\{\hat{H},\hat{K},\vec{j}^2,j_z\}$ 的共同本征函数只需要把 $\phi_1$ 与 $\phi_2$ 中的系数 $c_1$ 和 $c_2$ 换成待定的径向函数 $f(r)$ 和 $ig(r)$, 它们可表示成下列两种类型。

$$K=j+1/2,\quad \psi=\begin{pmatrix}\phi^A_{jm_j}f(r)\\ \phi^B_{jm_j}ig(r)\end{pmatrix}$$

$$K=-(j+1/2),\quad \psi=\begin{pmatrix}\phi^B_{jm_j}f(r)\\ \phi^A_{jm_j}ig(r)\end{pmatrix} \tag{7-128}$$

式中，$f(r)$ 与 $g(r)$ 由下述径向本征方程确定。

在 Pauli-Dirac 表象中，

$$\alpha_r=\begin{pmatrix}0&\sigma_r\\ \sigma_r&0\end{pmatrix},\quad \sigma_r=\frac{1}{r}\vec{r}\cdot\vec{\sigma} \tag{7-129}$$

利用

$$\sigma_r\phi^A_{jm_j}=-\phi^B_{jm_j},\quad \sigma_r\phi^B_{jm_j}=-\phi^A_{jm_j} \tag{7-130}$$

可得

$$\alpha_r\begin{pmatrix}\phi^A_{jm_j}f(r)\\ \phi^B_{jm_j}ig(r)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-\mathrm{i}\phi^A_{jm_j}g(r)\\ -\phi^B_{jm_j}f(r)\end{pmatrix},\quad \alpha_r\begin{pmatrix}\phi^B_{jm_j}f(r)\\ \phi^A_{jm_j}ig(r)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-\mathrm{i}\phi^B_{jm_j}g(r)\\ -\phi^A_{jm_j}f(r)\end{pmatrix} \tag{7-131}$$

类似有

$$\alpha_r\beta=\begin{pmatrix}0&\sigma_r\\ \sigma_r&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}I&0\\ 0&-I\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&-\sigma_r\\ \sigma_r&0\end{pmatrix} \tag{7-132}$$

$$\alpha_r\beta\begin{pmatrix}\phi^A_{jm_j}f(r)\\ \phi^B_{jm_j}ig(r)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\mathrm{i}\phi^A_{jm_j}g(r)\\ -\phi^B_{jm_j}f(r)\end{pmatrix},\quad \alpha_r\beta\begin{pmatrix}\phi^B_{jm_j}f(r)\\ \phi^A_{jm_j}ig(r)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\mathrm{i}\phi^B_{jm_j}g(r)\\ -\phi^A_{jm_j}f(r)\end{pmatrix} \tag{7-133}$$

从式 (7-133) 可以看出，$\alpha_r$ 和 $\alpha_r\beta$ 的作用不改变波函数的角度和自旋部分，只改变径向波函数, 其运算规则为

$$\alpha_r\text{的作用为}\quad \begin{pmatrix}f\\ g\end{pmatrix}\to\begin{pmatrix}-\mathrm{i}g\\ \mathrm{i}f\end{pmatrix}$$

$$\alpha_r\beta\text{的作用为}\quad \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} \mathrm{i}g \\ \mathrm{i}f \end{pmatrix}$$

亦即对径向波函数的运算可表示为

$$\alpha_r \sim \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix} \tag{7-134a}$$

$$\alpha_r\beta \sim \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix} \tag{7-134b}$$

把式 (7-128) 形式的波函数代入 Dirac 方程，可得出 $f(r)$ 与 $g(r)$ 满足的径向方程

$$\left[c\alpha_r\hat{p}_r + \frac{\mathrm{i}\hbar cK}{r}\alpha_r\beta + mc^2\beta + V(r) - E\right]\begin{pmatrix} f(r) \\ g(r) \end{pmatrix} = 0 \tag{7-135}$$

其中 $K = \pm(j+1/2)$，$\alpha_r$ 与 $\alpha_r\beta$ 如式 (7-134) 所示。在式 (7-135) 中如令

$$f(r) = \frac{F(r)}{r}, \quad g(r) = \frac{G(r)}{r} \tag{7-136}$$

利用

$$\hat{p}_r\frac{F(r)}{r} = -\mathrm{i}\hbar\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}r}, \quad \hat{p}_r\frac{G(r)}{r} = -\mathrm{i}\hbar\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}G}{\mathrm{d}r} \tag{7-137}$$

则可得出 $F(r)$ 和 $G(r)$ 满足的方程组

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}r} - \frac{K}{r}F &= \left[\frac{mc^2+E}{\hbar c} - \frac{V(r)}{\hbar c}\right]G(r), \\ \frac{\mathrm{d}G}{\mathrm{d}r} - \frac{K}{r}G &= \left[\frac{mc^2-E}{\hbar c} + \frac{V(r)}{\hbar c}\right]F(r) \end{aligned} \tag{7-138}$$

对于氢原子，$V(r) = -e^2/r$，则方程 (7-138) 化为

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}r} - \frac{K}{r}F &= \left(\frac{mc^2+E}{\hbar c} + \frac{\alpha}{r}\right)G, \\ \frac{\mathrm{d}G}{\mathrm{d}r} - \frac{K}{r}G &= \left(\frac{mc^2-E}{\hbar c} - \frac{\alpha}{r}\right)F \end{aligned} \tag{7-139}$$

式中 $\alpha = e^2/\hbar c \approx 1/137$，是精细结构常数。

### 7.4.7　氢原子光谱的精细结构

在束缚态边条件下求解氢原子的 Dirac 方程的径向方程 (7-139)，发现只有当能量本征值取下列分立值时，才能得到物理上合理的解

$$E = E_{n'K} = mc^2\left[1 + \frac{\alpha^2}{\left(\sqrt{K^2-\alpha^2}+n'\right)^2}\right]^{-1/2} \tag{7-140}$$

$$n' = 0, 1, 2, \cdots, |K| = (j + 1/2) = 1, 2, 3, \cdots$$

把式 (7-140) 对精细结构常数 $\alpha = e^2/\hbar c \approx 1/137 \ll 1$ 做幂级数展开，利用近似

$$\left(\sqrt{K^2 - \alpha^2} + n'\right)^{-2} \approx \left(n' + |k| - \frac{\alpha^2}{2\,|K|}\right)^{-2} \approx \frac{1}{n^2}\left[1 + \frac{\alpha^2}{n\,|K|}\right]$$

式中

$$n = n' + |K| = 1, 2, 3, \cdots \tag{7-141}$$

式 (7-140) 可表示为

$$\begin{aligned} E = E_{nK} &= mc^2\left[1 + \frac{\alpha^2}{n^2}\left(1 + \frac{\alpha^2}{n\,|K|}\right)\right]^{-1/2} \\ &= mc^2\left[1 - \frac{1}{2}\frac{\alpha^2}{n^2} - \frac{\alpha^4}{2n^4}\left(\frac{n}{|K|} - \frac{3}{4}\right) + \cdots\right] \end{aligned} \tag{7-142}$$

式 (7-142) 还可改写成

$$\begin{aligned} E_{nK} - mc^2 &= -\frac{mc^2\alpha^2}{2n^2}\left[1 + \frac{\alpha^2}{n^2}\left(\frac{n}{|K|} - \frac{3}{4}\right) + \cdots\right] \\ &= -\frac{e^2}{2a}\frac{1}{n^2}\left[1 + \frac{\alpha^2}{n^2}\left(\frac{n}{|K|} - \frac{3}{4}\right) + \cdots\right] \end{aligned} \tag{7-143}$$

式中，$a = \hbar^2/me^2$，是 Bohr 半径。若用量子数 $j$ 代替 $|K|$，得

$$E_{nj} - mc^2 = -\frac{e^2}{2a}\frac{1}{n^2}\left[1 + \frac{\alpha^2}{n^2}\left(\frac{n}{j + 1/2} - \frac{3}{4}\right) + \cdots\right] \tag{7-144}$$

可以看出，能级不仅与主量子数 $n$ 有关，而且依赖于 $j$(或 $|K|$)。式 (7-142) 或式 (7-143) 中右边第二项远小于第一项，这是相对论最低阶修正项。当忽略此项时，就回到 Bohr 氢原子能级公式 (除去一个常数项外)

$$E_n = -\frac{e^2}{2a}\frac{1}{n^2} \quad n = 1, 2, 3, \cdots \tag{7-145}$$

由于相对论修正，$n$ 相同 $j$ 不同的 Bohr 能级将发生分裂，但此修正很小 $[O(\alpha^2)]$，能级分裂是很微小的，这是氢原子能级精细结构的来源。在式 (7-141)$\sim$ 式 (7-143) 中，对于给定的 $n$，有

$$\begin{aligned} &|K| = 1, 2, 3, \cdots, n, \\ &j = |K| - 1/2 = 1/2, 3/2, 5/2, \cdots, n - 1/2, \\ &K = (j + 1/2) \quad (> 0), \quad l = j - 1/2, \end{aligned} \tag{7-146}$$

$$K = -(j + 1/2) \quad (< 0), \quad l = j + 1/2$$

式中 $l$ 是波函数 [式 (7-128)，式 (7-115) 和式 (7-116)] 的大分量中的球谐函数的阶，在非相对论极限下是好量子数。以 $n = 4$ 为例, 各能级为

| K | +1 | −1 | +2 | −2 | +3 | −3 | +4 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| ($n'$ | 3 | | 2 | | 1 | | 0 ) |
| $j$ | 1/2 | | 3/2 | | 5/2 | | 7/2 |
| $l$ | 0 | 1 | 1 | 2 | 2 | 3 | 3 |

光谱符号: $4s_{1/2}4p_{1/2}4p_{3/2}4d_{3/2}4d_{5/2}4f_{7/2}$ , 其中, 在非相对论近似下简并的能级分裂为 $(4s_{1/2}4p_{1/2})$, $(4p_{3/2}4d_{3/2})$, $(4d_{5/2}, 4f_{5/2})$, $(4f_{7/2})$ 四条能级, 但 $(nj)$ 相同的能级仍然简并。

氢原子光谱理论的发展，是量子力学理论发展的一个重要侧面。氢原子是最简单的原子，数学处理比较容易，可以找出其解析解。但氢原子光谱的精密观测却并不是一件容易的事。实验观测肯定了 Dirac 理论给出的相对论修正。然而早在 20 世纪 30 年代，就有人发现 Dirac 理论与氢原子光谱的精细结构的观测还有一定的微小差异。但由于当时实验的精确度不够，没有引起人们的重视。直到 1945 年 Lamb 与 Rutherford 利用微波技术精确地测定了氢原子光谱的精细结构，肯定了同一个 $(nj)$ 的能级按照宇称不同还有微小的分裂。例如，$2s_{1/2} - 2p_{1/2}$ 能级发生分裂，$2s_{1/2}$ 能级略高 ($\Delta E = \hbar\Delta\omega, \quad \Delta\omega = 1057.8 \pm 0.1\text{MHz}$)。这就是有名的 Lamb 移动 (shift)。它与精细结构分裂 $\Delta\omega(2p_{3/2} - 2p_{1/2}) = 10950\text{MHz}$ 相比，小一个数量级。类似的分裂还有 $3s_{1/2}$ 能级略高于 $3p_{1/2}$，$3p_{3/2}$ 能级略高于 $3d_{3/2}$ 等。

与电子的反常磁矩一样，Lamb 移动是作为单电子理论的 Dirac 相对论性量子力学所不能解释的。为了说明它们，需要考虑真空量子涨落，把 Dirac 方程看成一个多粒子系统的场方程，并对场进行量子化 ( 所谓的二次量子化), 把 Dirac 方程变成量子化的电子场与光子场相互作用的算符方程, 再与光子场的方程耦合起来, 就成为量子电动力学的基本方程组, 是当时量子场论的主要内容。在量子电动力学的量子场论中，计及真空极化和辐射修正之后，可以满意地解释电子的反常磁矩和 Lamb 移动。这是 20 世纪 40 年代末量子电动力学取得的重大成果, 由此促进了量子场论重整化理论的发展, 把量子电动力学推进到一个新的阶段。

### 7.4.8 电子与电磁场相互作用系统的 Lagrange

前面是把电磁场 $(\vec{A}, \phi)$ 看成固定的外场来讨论电子在外界给定的电磁场中的运动。若把电磁场也看成另一种物质场的动力学变量，它们与电子相互作用时也会发生变化。这样以来, 电子场与电磁场构成一个更复杂的动力学系统，其 Lagrange

量密度为

$$L=\bar{\psi}\left[\gamma_\mu\left(p_\mu+\frac{e}{c}A_\mu\right)+m\right]\psi-\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F_{\mu\nu} \tag{7-147}$$

$$I=\int L(x)\mathrm{d}^4x \tag{7-148}$$

其中电磁场张量

$$F_{\mu\nu}=\partial_\mu A_\nu-\partial_\nu A_\mu \tag{7-149}$$

从最小作用量原理 $\delta I_{\bar{\psi}}=0$, 可得与电磁场耦合的电子场的 Dirac 方程; 从 $\delta_{A_\mu}I=0$ 可得有电流密度源的电磁场的麦克斯韦方程。对 $\psi,\bar{\psi},A_\mu$ 量子化后就过渡到量子电动力学 (QED)。

# 7.5 量子场论初步：量子电动力学、量子强子动力学与 Walecka 模型

## 7.5.1 量子电动力学初步

7.4 节介绍的电磁场中的 Dirac 方程，是一个电子在外加的电磁场中的运动方程，电子的运动虽然是量子力学的，但仅是一个电子的问题，而不是多电子系统的问题；对于电磁势 $(\vec{A},\phi)$，它不仅是经典的，而且是固定的。

如果把电子的波函数 $\psi(x)$ 看成多电子系统的场算符，把电磁场 $A_\mu$ 看成动力学变量即另一类矢量粒子 (光子) 的场算符，则我们得到包括电子场和电磁场及其相互作用的动力系统[4,5]，其 Lagrange 为式 (7-147) 和式 (7-149)

$$L=\bar{\psi}\gamma_\mu\left(\partial_\mu+\mathrm{i}\frac{e}{c}A_\mu\right)\psi+m\bar{\psi}\psi-\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F_{\mu\nu}\quad(x_4=\mathrm{i}ct)$$

$$F_{\mu\nu}=\partial_\mu A_\nu-\partial_\nu A_\mu$$

从二次量子化理论可知，作为费米场 $\psi(x)$，应满足反对易关系。由于 $\psi(x)$ 对应的广义动量为

$$\Pi_\psi(x)=\frac{\delta L}{\delta\dot{\psi}}=\mathrm{i}\psi^+ \tag{7-150}$$

所以反对易关系为

$$\left\{\psi(xt),\psi^+(x',t)\ \right\}=\delta(x-x') \tag{7-151}$$

$$\{\psi(xt),\psi(x',t)\ \}=\left\{\psi^+(x,t),\psi^+(x',t)\right\}=0$$

而 $A_\mu$ 为玻色场，其广义动量为

$$\Pi_{A_\mu}=\frac{\delta L}{\delta\dot{A}_\mu}=\dot{A}_\mu \tag{7-152}$$

所以有对易关系

$$\left[A_\mu(x,t),\dot{A}_\nu(x',t)\right]=\mathrm{i}\delta_{\mu\nu}\delta(x-x') \tag{7-153}$$

$$[A_\mu(x,t),A_\nu(x',t)]=\left[\dot{A}_\mu(x,t),\dot{A}_\nu(x',t)\right]=0$$

上述对易式和反对易式，是玻色场 $A_\mu(\vec{r},t)$ 和费米场 $\psi(\vec{r},t)$ 的量子化条件。这时电子场和电磁已变成了量子场；对电子而言，从 Dirac 方程描述的单个粒子的问题，变成了由无数电子和正电子组成的多体问题；对电磁场而言，从经典电磁场变成了量子光子场。这时，$\psi(x),\psi^+(x),A_\mu(x)$ 已成为场算符，包含了电子、正电子和光子的产生、消灭算符，正如我们在二次量子化表象中所讲的那样。如果在某一正交完备的单粒子态表象中把它们展开，其形式与前面讲的多体系统的二次量子化的形式一样, 只不过时空坐标应是 Lorentz 时空的坐标, 整个理论是相对论协变的。

上述由电子场 $\psi(x)$ 和电磁场 $A_\mu(x)$ 构成的量子化的 Lagrange，是量子电动力学的出发点，它描述电子 (正电子) 场与电磁场相互作用，交换光子、光子产生正负电子对和正负电子对湮灭成光子的量子场论过程。

$L$ 还可以写成自由场 Lagrange 量 $L_0$ 与相互作用 Lagrange 量 $L_{in}$ 之和

$$L=L_0+L_{in} \tag{7-154}$$

式中，

$$L_0=\bar{\psi}r_\mu\partial_\mu\psi+mc\bar{\psi}\psi-\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F_{\mu\nu} \tag{7-155}$$

$$L_{in}=\mathrm{i}\frac{e}{c}\bar{\psi}r_\mu\psi A_\mu \tag{7-156}$$

其中 $L_0$ 包括自由电子场和自由电磁场的 Lagrange，$L_{in}$ 是规范不变性确定的相互作用的 Lagrange。由此，可以得到系统的 Hamilton 量，也包括自由场部分和相互作用部分。

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}_{in} \tag{7-157}$$

量子电动力学的求解步骤如下：

(1) 在相互作用绘景中求解状态的 Schroedinger 方程的时间演化算子，把 $\hat{H}_{in}$ 当作微扰，由时间演化算子求出 $S$-矩阵。

(2) 把 $\psi(x),A_\mu(x)$ 按 $\hat{H}_0$ 的自由平面波的本征解展开，把 $S$-矩阵用自由粒子的产生, 消灭算符表示, 并通过 Fourier 变换过渡到动量–能量表象。

(3) 算出自由场 $\psi$ 和 $A_\mu$ 的单粒子传播子。

(4) 用 Wick 定理计算 $S$-矩阵对一定物理过程的初态和末态的矩阵元。

(5) 用 Feynman 图和 Feynman 规则简化碰撞和散射过程的矩阵元的计算。

(6) 对于圈图发散问题, 运用重整化方案处理。

量子电动力学已成为量子场论的经典，它对微观世界的电磁相互作用过程作出了极为精确的描述。20 世纪 60 年代以来，人们把电磁相互作用与弱相互作用统一起来，发展了弱电统一的规范场理论 (QWED)，成为量子场论发展的又一个里程碑。

从 20 世纪 70 年代以来，人们把相互作用的规范场理论，推广到强相互作用，发展了强作用的 SU(3) 色规范场理论 —— 量子色动力学 (QCD)，对强相互作用过程的描述十分成功。

弱电统一理论和量子色动力学，对自然界的相互作用 (除引力之外)，作出了全面的描述，是物理学的辉煌成就。QWED 与 QCD 二者称为基本粒子的标准模型 (standard model of particle physics )，代表了目前物理学对微观世界认识的最高水平。

人们正进一步追求把引力也包括在内的统一理论，这是极其艰巨而伟大的目标。

量子论的发展过程如下[6−8]：

QED<br>
量子力学 → 量子场论 (包括) QWED (统称) 标准模型 (standard model)→<br>
QCD

大统一 (grand unification)→

包括量子引力理论的统一理论：其候选者是超弦理论 (theory of superstring)?

### 7.5.2 量子强子动力学初步

在从 QED 向 QCD 发展的 30 年中，人们探索了各种描述强相互作用的理论，在 20 世纪 60 年代末 70 年代初，Walecka 集其大成，发展了描述强子相互作用的等效的量子理论：量子强子动力学 (QHD)[9-12]。

发展 QHD 的另一个动机，是核物理学的需要。经典核物理把原子核看成由质子和中子组成，其间存在强相互作用与 Coulomb 相互作用。这种理论称为量子核子动力学 (quantum nucleon dynamics, QND)。实验发现，核内还存在介子 (如 π 介子等)，核子还有激发态 (如 Δ 粒子等)，核内还可能存在超子。这些参与强相互作用的粒子，统称强子 (hadron)，描述它们相互作用的等效理论称为量子强子动力学。现在发现，QHD 是 QCD 的低能极限下的等效理论。目前，基于 QHD 的原子核的相对论性平均场理论相当成功，有必要对 QHD 进行简要介绍。

Walecka 的 QHD 的 Lagrange 可写成

$$L_{\text{QHD}} = L_N + L_M + L_A + L_{\text{int}} \tag{7-158}$$

式中，$L_N$ 为核子自由场的 Lagrange。

$$L_N = \bar{\psi}(r_\mu \partial_\mu + m)\psi \tag{7-159}$$

核子场 $\psi$ 为 Lorentz 空间的旋量 (4 分量)，同位旋空间的旋量 (二分量：中子与质子分量)。自由介子场的 $L_M$ 为

$$\begin{aligned} L_M = &-\left(\frac{1}{2}\partial_\mu\sigma\partial^\mu\sigma - U(\sigma)\right) - \left(\frac{1}{2}\partial_\mu\vec{\pi}\partial^\mu\vec{\pi} - \frac{1}{2}m_\pi\vec{\pi}^2\right) \\ &-\frac{1}{4}\Omega_{\mu\nu}\Omega^{\mu\nu} + \frac{1}{2}m_\omega^2\vec{\omega}^2 - \frac{1}{4}\vec{R}_{\mu\nu}\vec{R}_\mu^{\mu\nu} + \frac{1}{2}m_\rho^2\vec{\rho}^{\ 2} \end{aligned} \tag{7-160}$$

自由电磁场的 Lagrange 为

$$L_A = -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} \tag{7-161}$$

其中, 各种强子在 Lorentz 空间和同位旋空间的张量性质见表 7-1。

**表 7-1　各种强子在 Lorentz 空间和同位旋空间的张量性质**

| 强子名称 | Lorentz 空间的张量性质 | 同位旋空间的张量性质 |
|---|---|---|
| 核子 | 旋量 (4 分量) | 旋量 (2 分量) |
| σ-介子 | 标量 (1 分量) | 标量 (1 分量) |
| π-介子 | 赝标量 (1 分量) | 矢量 (3 分量) |
| Ω-介子 | 矢量 (4 分量) | 标量 (1 分量) |
| $\vec{\rho}$-介子 | 矢量 (4 分量) | 矢量 (3 分量) |

介子场与核子场的相互作用 Lagrange $L_{\text{int}}$ 为

$$\begin{aligned} L_{\text{int}} = -g_\sigma\bar{\psi}\sigma\psi - \frac{f_{\bar{n}}}{m_\pi}\bar{\psi}r^5 r_\mu\partial^\mu\vec{\pi}\cdot\vec{\tau}\psi - g_\varpi\bar{\psi}\gamma_\mu\omega^\mu\psi - g_\rho\bar{\psi}r_\mu\vec{\rho}^\mu\cdot\vec{\tau}\psi \\ -e\bar{\psi}r_\mu A^\mu\frac{(1-\tau_3)}{2}\psi \end{aligned} \tag{7-162}$$

其中

$$U(\sigma) = \frac{1}{2}m_\sigma^2\sigma^2 + \frac{1}{3}g_2\sigma^3 + \frac{1}{4}g_3\sigma^4 \tag{7-163}$$

是 $\sigma$- 介子场的非线性自相互作用势能, 其他矢量介子场的反对称张量为

$$\Omega^{\mu\nu} = \partial^\mu\omega^\mu - \partial^\mu\omega^\mu, \vec{R}^{\mu\nu} = \partial^\mu\vec{\rho}^{\ \nu} - \partial^\nu\vec{\rho}^{\ \mu}, F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu \tag{7-164}$$

从 Euler-Lagrange 方程

$$\frac{\partial L}{\partial q_j} - \partial_\mu\frac{\partial L}{\partial(\partial_\mu q_j)} = 0 \tag{7-165}$$

可得各种场的运动方程，其中广义坐标 $q_j = \{\psi, \vec{\pi}, \sigma, \vec{\rho}^\mu, \varpi^\mu, A_\mu\}$，广义动量为

$$p_j = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \tag{7-166}$$

由此可构造 Hamilton 量密度

$$H = \sum_i p_i \dot{q}_i - L \quad \hat{H} = \int H(x) \mathrm{d}\vec{r} \tag{7-167}$$

各种场的量子化，可通过费米场 $\psi$ 的反对易子和介子场 $\{\sigma, \vec{\pi}, \vec{\rho}^{\mu}, \varpi^{\mu}, A_{\mu}\}$ 的对易子来实现。相互作用的 S-矩阵可以仿照 QED 进行计算。

目前，QHD 主要用于核子 (有时还包括某些重子) 的相对论平均场理论的计算，已有比较完善的计算程序，大量的计算结果与实验符合很好。这方面的进展可参阅文献[9−12]。

## 参 考 文 献

[1] Dirac P A M. The Principle of Quantum Mechanics,New York: Oxford University Press, 1958. Dirac P AM. 量子力学原理. 北京：科学出版社, 1965.

[2] Bjorken J D，Drell S D. Relativistic Quantum Mechanics and Relativistic Quantum Fields.New York：McGraw-Hill, 1964,1965.

[3] Wang S J, Zhou S G. Retrieving the missed particle-antiparticle degrees of freedom of Dirac particles. arXiv: hep-th-0501250; 王顺金, 周善贵, Pauli H C. 原子核物理评论，2004, 21(4): 94–97.

[4] Itzykson C, Zuber J B. Quantum Field Theory. New York: McGraw-Hill, 1980.

[5] Weinberg S. The Quantum Theory of fields. I, II, III.Cambridge: Cambridge University Press. 1995, 1996, 2000.

[6] Donoghue J F, Goloeich E, Holstein B R. Dynamics of the Standard Model. Cambridge: Cambridge University Press, 1992.

[7] Ross G G. Grand Unifield Theories. The Benjamin/Cummings Publishing Company INC, 1985.

[8] Polchinski J. String Theory. I, II. Cambridge :Cambridge University Press, 1998.

[9] Serot B D , Walecka J D. Adv Nucl Phys, 1986, 16: 1.

[10] Serot B D. Rep Prog Phys, 1992, 55: 1855.

[11] Ring P. Progr Part Nucl Phys, 1996, 37: 193.

[12] Meng J, Toki H, Zhou S G, et al. Progr Part Nucl Phys, 2006, 57(2): 476–563.

# 第 8 章　量子力学的积分形式与路径积分

## 8.1　量子力学的路径积分形式

量子力学的 Schroedinger 形式是建立在力学量算符 (能量、动量算符) 的微分表示的基础之上，它的运动方程 ——Schroedinger 方程是偏微分方程。因此，这是量子力学的微分形式。正像马克斯威尔方程是电磁场理论的微分形式，而高斯定律、安培定律、法拉第定律是电磁场理论的积分形式一样，量子力学也有积分形式，这就是量子力学的 Feynman 路径积分形式[1,2,6]。

### 8.1.1　从 Schroedinger 微分形式到 Feynman 路径积分形式

从 Schroedinger 微分形式向 Feynman 路径积分形式过渡的关键是引进传播子,用它做桥梁把二者联系起来。

1. 传播子

1) 传播子的定义

时间有关的 Schroedinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial|\psi(t)\rangle}{\partial t}=\hat{H}|\psi(t)\rangle \tag{8-1}$$

的解可写成

$$|\psi(t)\rangle=\hat{U}(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle,\quad t>t_0 \tag{8-2}$$

其中，包含全部动力学信息、确定状态时间演化规律的时间演化算子定义为

$$\hat{U}(t,t_0)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}(t-t_0)/\hbar} \tag{8-3}$$

把粒子状态波函数 $\psi$ 从时空点 $(x,t)$ 传播到 $(x',t')$ 的传播子 $K(x',t';x,t)$，定义为时间演化算子 $\hat{U}(t,t_0)$ 在坐标空间的矩阵元，即

$$K(x',t';x,t)=\langle x'|\hat{U}(t',t)|x\rangle=\langle x'|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}(t'-t)/\hbar}|x\rangle \tag{8-4}$$

2) 传播子 $K(x',t';x,t)$ 的性质

从式 (8-2) 的 $x$-表象可得

$$\psi(x,t)=\langle x|\psi(t)\rangle=\int\langle x|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}(t-t_0)/\hbar}|x'\rangle\langle x'|\psi(t_0)\rangle\mathrm{d}x'$$

$$= \int K(x,t;x',t_0)\psi(x',t_0)\mathrm{d}x' \tag{8-5}$$

式 (8-5) 用到基矢 $|x'\rangle$ 的正交、完备性条件，即

$$\langle x'|x''\rangle = \delta(x'-x'') \tag{8-6a}$$

$$\int |x'\rangle\langle x'|\mathrm{d}x' = 1 \tag{8-6b}$$

由

$$\psi(x,t) = \int K(x,t;x',t)\psi(x',t)\mathrm{d}x' \tag{8-7}$$

可知

$$K(x,t;x',t) = \delta(x-x') \tag{8-8}$$

从时间演化算子作为单参数群的性质

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}(t''-t)/\hbar} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}(t''-t')} \cdot \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}(t'-t)} \tag{8-9}$$

可得其矩阵元形式即传播子的传递性质

$$K(x'',t'';x,t) = \int K(x'',t'';x',t')K(x',t';x,t)\mathrm{d}x' \tag{8-10}$$

3) 传播子的运动方程及其解的谱分解

把式 (8-5) 代入 Schroedinger 方程 (8-1), 可得传播子 $K(x',t';x,t)$ 的运动方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\int K(x,t;x',t')\psi(x',t')\mathrm{d}x' = \int \hat{H}(x)K(x,t;x',t')\psi(x',t')\mathrm{d}x'$$

由于 $\psi(x',t')$ 的任意性，故得 $K(x,t;x',t')$ 的运动方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}K(x,t;x',t') = \hat{H}(x)K(x,t;x',t'), \quad t-t'>0 \tag{8-11}$$

其初始条件为式 (8-8)，$K(x,t;x',t) = \delta(x-x')$. 由此有 $\int K(x,t;x',t)\mathrm{d}x' = 1$
若设

$$K(x,t;x',t') = 0, \quad t-t'<0 \tag{8-12}$$

则传播子 $K(x',t';x,t)$ 的运动方程 (8-11) 可改写为

$$\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}\right)K(x,t;x',t') = \mathrm{i}\hbar\delta(x-x')\delta(t-t') \tag{8-13}$$

式 (8-13) 又是时间有关的 Schroedinger 方程的 Green 函数 $G(x,t;x',t')$ 的运动方程，$K(x',t';x,t)$ 就是 Green 函数 $G(x,t;x',t')$，是方程 (8-13) 的解，其谱分解为

$$K(x,t;x',t') = G(x,t;x',t') = \frac{\mathrm{i}\hbar}{\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial t} - \hat{H}}\delta(x-x')\delta(t-t')$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{\mathrm{i}\hbar}{2\pi}\sum_n\int\frac{1}{\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}-\hat{H}(x)}\psi_n(x)\psi_n^*(x')\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t')}\mathrm{d}\omega \\
&= \frac{\mathrm{i}\hbar}{2\pi}\sum_n\int\frac{1}{\hbar\omega-E_n}\psi_n(x)\psi_n^*(x')\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t')}\mathrm{d}\omega \\
&= \sum_n\psi_n(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_nt/\hbar}\psi_n^*(x')\mathrm{e}^{\mathrm{i}E_nt'/\hbar}
\end{aligned}
\tag{8-14a}
$$

事实上，对 $K(x',t';x,t)$ 的直接计算也给出同一结果，

$$
\begin{aligned}
K(x,t;x',t') &= \langle x|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}(t-t')/\hbar}|x'\rangle = \sum_n\langle x|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}|\psi_n\rangle\langle\psi_n|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t'/\hbar}|x'\rangle \\
&= \sum_n\psi_n(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_nt/\hbar}\psi_n^*(x')\mathrm{e}^{\mathrm{i}E_nt/\hbar}
\end{aligned}
\tag{8-14b}
$$

计算中用了完备性条件 $\sum\limits_n|\psi_n\rangle\langle\psi_n|=I$ 和本征方程 $\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$。传播子 $K(x,t;x',t')$ 的对时间变量的 Fourier 变换为

$$
\begin{aligned}
K(x,x';\omega) = G(x,x';\omega) &= \int K(x,t;x',t')\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega(t-t')}\mathrm{d}(t-t') \\
&= -\mathrm{i}\hbar\sum_n\frac{\psi_n(x)\psi_n^*(x')}{\hbar\omega-E_n}
\end{aligned}
\tag{8-15}
$$

由式 (8-5) 和式 (8-15) 可知，传播子 $K(x,t;x',t')$ 包含了量子系统的全部信息：

(1) $\hat{H}$ 的本征值由 $K(x,x';\omega)$ 的极点位置决定；

(2) $\hat{H}$ 的本征矢由 $K(x,x';\omega)$ 的留数函数决定；

(3) 波函数的时间演化由 $K(x,t;x',t')$ 决定。

因此，计算传播子与求解 Schroedinger 方程是等价的。

2. 计算传播子的路径积分方法

传播子的计算有多种方法。事实上, 式 (8- 14a) 和式 (8-14b) 给出的是用 $\hat{H}$ 的本征解计算传播子的方法，即传播子的谱分解法。对 $\hat{H}$ 的本征解已知的系统，这种方法很方便，如自由粒子，其本征解为

$$
\psi_p(x,t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar-\frac{p^2}{2m}t/\hbar}
\tag{8-16a}
$$

把式 (8-16a) 代入式 (8-14a)，易得

$$
\begin{aligned}
K(x,t;x',t') &= \frac{1}{(2\pi\hbar)}\int\mathrm{d}p\psi_p(x,t)\psi_p^*(x',t') \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)}\int\mathrm{d}p\mathrm{e}^{\mathrm{i}p(x-x')/\hbar-\mathrm{i}\frac{p^2}{2m}(t-t')}
\end{aligned}
$$

$$= \left[\frac{m}{2\pi\hbar \mathrm{i}(t-t')}\right]^{1/2} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}m(x-x')^2}{2\hbar(t-t')}} \tag{8-16b}$$

此处用到

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}ax^2}\mathrm{d}x = (\frac{\pi}{a\mathrm{i}})^{1/2} \tag{8-16c}$$

当 $t-t'=\varepsilon\to 0$ 时，得到以后常用到的无限小传播子, 它是计算有限时间间隔的传播子的基础。

$$\begin{aligned}
K(x,x';\varepsilon) &= \left[\frac{m}{2\pi\hbar \mathrm{i}\varepsilon}\right]^{1/2} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{m(x-x')^2}{2\hbar\varepsilon}} \\
&= \left[\frac{m}{2\pi\hbar \mathrm{i}\varepsilon}\right]^{1/2} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\frac{1}{2}mv^2)\varepsilon}(v=(x-x')/\varepsilon) \\
&= \left[\frac{m}{2\pi\hbar \mathrm{i}\varepsilon}\right]^{1/2} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}L\varepsilon} = \left[\frac{m}{2\pi\hbar \mathrm{i}\varepsilon}\right]^{1/2} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\delta_\varepsilon S}
\end{aligned} \tag{8-17}$$

式 (8-17) 的重要性在于给出用无限小经典作用量 $\delta_\varepsilon S = L\varepsilon$ 表达无限小传播子的公式，而且具有普遍性：无限小经典作用量 $\delta_\varepsilon S$ 决定了粒子沿无限小经典轨道上的无限小传播子；有限长轨道上的传播子是这些无限小传播子的叠加。这样, 就把经典力学作用量与量子力学传播子联系了起来, 这正是下面要讲的 Feynman 路径积分的基本思想和创新之处。

现在用另一种方法, 即路径积分法计算传播子, 它基于无限小经典作用量 $\delta_\varepsilon S$ 决定了粒子沿无限小经典轨道上的无限小传播子。考虑一个粒子的一般情况，设

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x) \tag{8-18}$$

为了利用式 (8-17) 的结果，计算每条轨道对传播子的贡献，把时间细分很小的间隔

$$t_0, t_0+\varepsilon, t_0+2\varepsilon, \cdots, t_0+N\varepsilon = t,$$

$$t_0, t_1, t_2, \cdots, t_N = t \tag{8-19a}$$

相应地利用传播子的传递性, 把式 (8-4) 改写为

$$\begin{aligned}
K(x,t;x_0,t_0) =& \langle x|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}(t-t_{N-1})/\hbar}\cdots \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}(t_3-t_2)/\hbar} \\
&\cdot \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}(t_2-t_1)/\hbar}\cdot \mathrm{e}^{-\mathrm{i}H(t_1-t_0)/\hbar}|x_0\rangle \\
=& \int \mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\cdots\mathrm{d}x_{n-1}\langle x|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}(t-t_{N-1})/\hbar}|x_{N-1}\rangle \\
&\cdots\langle x_2|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}(t_2-t_1)/\hbar}|x_1\rangle\langle x_1|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H(t_1-t_0)/\hbar}|x_0\rangle
\end{aligned}$$

$$= \int \cdots \int \mathrm{d}x_1 \mathrm{d}x_2 \cdots \mathrm{d}x_{N-1} K(x,t;x_{N-1},t_{N-1}) \\ \cdots K(x_2,t_2;x_1,t_1) K(x_1,t_1;x_0,t_0) \tag{8-19b}$$

其中，

$$\begin{aligned} K(x_{n+1},t_{n+1};x_n,t_n) &= \langle x_{n+1}|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}(x_n)\varepsilon/\hbar}|x_n\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}(x_n)\varepsilon/\hbar}\delta(x_{n+1}-x_n) \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int \mathrm{d}\vec{p}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}_n^2+V(x_n)\right)\varepsilon/\hbar}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{p}(\vec{x}_{n+1}-\vec{x}_n)/\hbar} \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int \mathrm{d}\vec{p}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left(\frac{p^2}{2m}+V(x_n)\right)\varepsilon/\hbar}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{p}(\vec{x}_{n+1}-\vec{x}_n)/\hbar} \\ &= \left[\frac{m}{2\pi\hbar\mathrm{i}\varepsilon}\right]^{3/2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(\frac{m}{2}\left(\frac{x_{n+1}-x_n}{\varepsilon}\right)^2-V(x_n)\right)\varepsilon} \\ &= \left[\frac{m}{2\pi\hbar\mathrm{i}\varepsilon}\right]^{3/2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}L(x_n,\dot{x}_n)\varepsilon} \end{aligned} \tag{8-19c}$$

式 (8-19c) 的计算中用 $\delta(x_{n+1}-x_n)$ 动量积分表达式，而 $L(x_n,\dot{x}_x)$ 是经典力学 Lagrange

$$L(x_n,\dot{x}_n) = \frac{m}{2}\dot{x}_n^2 - V(x_n), \quad \dot{x}_n = \frac{x_{n+1}-x_n}{\varepsilon}, \quad \varepsilon\to 0 \tag{8-19d}$$

当 $\varepsilon\to 0$ 时，沿轨道 $\{x_n(t_n)\}$ 的作用量为

$$\sum_{n=1}^{N-1} L(x_n,\dot{x}_n)\varepsilon = \int_{t_0}^{t} L(x,\dot{x})\mathrm{d}t = S[x(t),x_0(t_0)] \tag{8-20}$$

把式 (8-19c) 代入式 (8-19b) 得

$$K(x,t;x_0,t_0) = C\int\prod_{n=1}^{N-1}\mathrm{d}x_n \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum\limits_{n=1}^{N-1}L(x_n,\dot{x}_n)\varepsilon} \tag{8-21a}$$

其中, $C$ 是归一化因子, 积分 $\displaystyle\int\prod_{n=1}^{N-1}\mathrm{d}x_n$ 意味着对端点为 $\{x(t),x_0(t_0)\}$ 的所有轨道求和。因此，式 (8-21a) 可写为

$$K(x,t;x_0,t_0) = C\sum_{\text{all}\cdot\text{paths}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[x(t),x_0(t_0)]} \tag{8-21b}$$

$$= \int Dx(t)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[x(t),x_0(t_0)]} \tag{8-21c}$$

式 (8-21a) 和式 (8-21b) 是计算传播子的路径积分表达式，它是端点为 $\{x(t),x_0(t_0)\}$ 的所有轨道贡献的叠加，每条轨道贡献一列 Hamilton–Jacobi 作用量 $S[x(t),x_0(t_0)]$

对应的波, 该轨道的作用量给出这列波的等相位 $S/\hbar$ 的波阵面, 而这列波的振幅正比于 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}S[x(t),x(t_0)]/\hbar}$。真空量子效应的体现之一是 Planck 常量 $\hbar$ 成为作用量的最小度量单位被引进。经典轨道只是作用量的变分极小的 $(\delta S[x(t),x_0(t_0)]=0)$、保持粒子系统能量–动量守恒, 因而是真空涨落与粒子交换能量动量的平均值为零的稳定轨道。由于真空量子涨落提供了能量动量，所有在经典力学意义上能量动量不守恒的、非经典轨道也作出贡献, 这是真空量子效应的体现之二。真空量子涨落在测不准关系的控制下与粒子交换能量动量，使所有粒子轨道对粒子波的传播作出贡献。因此，量子力学可以看成 Lagrange 经典力学考虑了真空量子涨落与粒子交换能量动量以后，粒子波沿一切可能的轨道对应的一系列 Hamilton–Jacobi 波传播叠加的结果。总之, 真空量子涨落效应表现在两个方面: ①真空量子涨落提供了一个作用量的最小的普适的度量单位 $\hbar$;② 这个最小的作用量的普适的度量单位 $\hbar$ 是真空量子涨落的特征量, 它控制着真空与粒子交换能量动量的过程。量子力学可以看成考虑了真空量子涨落效应后的微观粒子的动力学, 而真空量子涨落效应在量子力学中表现出的特征量是 Planck 常量 $\hbar$。在宏观世界，$S/\hbar$ 很大，只有 $\delta S=0$ 附近的轨道的相位相近，因而发生建设性的、密集加强的波的相干叠加，这些密集加强的相干波就演变成粒子的经典运动轨道。其余的轨道由于相位差很大而导致破坏性相干抵消，而不做出贡献。这类似于光波的干涉和衍射现象，光子的经典轨道 (几何光学轨道) 对应于光波干涉和衍射后的锐化的明纹。这样，量子力学从波动相干的观点解释了经典轨道出现的原因和过程，统一了粒子轨道运动和波的运动的表观矛盾: 经典轨道是波动相干导致高度定域化的结果。由于在具有稳定性的经典轨道附近, 真空量子涨落效应对经典粒子的影响很小。因此, 可以把经典力学看成忽略了真空量子涨落效应后的动力学, 或者是没有量子涨落的平稳真空内的动力学。相反, 量子力学则是量子涨落真空内的动力学。总之，路径积分形式阐述了量子力学与经典 Lagrange 力学的深刻联系，揭示了经典粒子运动与量子波的运动的区别和联系, 使人们对真空量子涨落的性质有了更深刻认识。

### 8.1.2　从 Feynman 形式到 Schroedinger 形式

前面我们从 Schroedinger 方程出发，引进了传播子，讨论了它的性质，论证了传播子包含量子系统的全部信息 (定态的本征能谱和非定态的时间演化)，同时给出了计算传播子的路径积分表达式。既然传播子包含量子系统的全部信息，它又可以用路径积分表示，那么就有可能重新表述量子力学，把它建立在传播子的路径积分形式之上。这正是 Feynman 的基本思想。

1. Feynman 的量子力学原理

Feynman 的量子力学基本原理有三条：

(1) 量子态用几率幅 $\psi(x,t)$ 描述;

(2) 几率幅的时间演化由传播子决定, $\psi(x,t)=\int K(x,t;x_0,t_0)\psi(x_0,t_0)\mathrm{d}x_0$;

(3) 传播子由路径积分给出，$K(x,t;x_0,t_0)=C\sum\limits_{\text{all}\cdot\text{paths}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[x(t),x_0(t_0)]}$。

路径积分可由经典作用量计算, $S[x(t),x_0(t_0)]=\int_{x_0(t_0)}^{x(t)}L(x,\dot{x})\mathrm{d}t, L(x,\dot{x})=\dfrac{m}{2}\dot{x}^2-V(x)$. 有了传播子，就可以计算量子力学所有物理量，因为它包含系统的全部信息。

2. 与 Schroedinger 形式的等价性

量子力学的 Feynman 形式与 Schroedinger 形式的等价性应从两方面证明：

(1) 从 Schroedinger 形式可以推导出 Feynman 形式，这在前面已经做到了；

(2) 从 Feynman 形式推导出 Schroedinger 形式，这是下面要做的。

Schroedinger 方程的推导。

由式 (8-4) 有

$$\psi(x,t+\varepsilon)=\int K(x,t+\varepsilon;x_0,t)\psi(x_0,t)\mathrm{d}x_0,\quad \varepsilon\to 0 \tag{8-22}$$

先证明下面的等式, 由

$$\begin{aligned}
\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}L(x,\dot{x})\varepsilon}&=\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[\left(\frac{1}{2}m(\frac{x-x_0}{\varepsilon})^2-V(x)\right]\varepsilon}\\
&=\left(\frac{m}{2\pi\hbar\mathrm{i}\varepsilon}\right)^{-3/2}\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3\int\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[\frac{p^2}{2m}+V(x)\right]\varepsilon}\mathrm{e}^{\mathrm{i}p(x-x_0)/\hbar}\mathrm{d}\vec{p}\\
&=\left(\frac{m}{2\pi\hbar\mathrm{i}\varepsilon}\right)^{-3/2}\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}_x^2+V(x)\right]\varepsilon}\int\mathrm{e}^{\mathrm{i}p(x-x_0)/\hbar}\mathrm{d}\vec{p}\\
&=\left(\frac{m}{2\pi\hbar\mathrm{i}\varepsilon}\right)^{-3/2}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}\varepsilon}\delta(x-x_0)=\left(\frac{m}{2\pi\hbar\mathrm{i}\varepsilon}\right)^{-3/2}\langle x|\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}\varepsilon}|x_0\rangle\\
&=\left(\frac{m}{2\pi\hbar\mathrm{i}\varepsilon}\right)^{-3/2}K(x,t+\varepsilon;x_0,t)
\end{aligned}\tag{8-23a}$$

得到等式

$$K(x,t+\varepsilon;x_0,t)=\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}\varepsilon}\delta(x-x_0)\tag{8-23b}$$

$$K(x,t+\varepsilon;x_0,t)=\left(\frac{m}{2\pi\hbar\mathrm{i}\varepsilon}\right)^{3/2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}L(x,\dot{x})\varepsilon}\tag{8-23c}$$

把式 (8-23b) 代入式 (8-22) 有

$$\psi(x,t+\varepsilon)=\int(\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}\varepsilon}\delta(x-x_0))\psi(x_0,t)\mathrm{d}x_0$$

$$
= \int \delta(x - x_0)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}\varepsilon}\psi(x_0, t)\mathrm{d}x_0 = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}\varepsilon}\psi(x, t)
$$

$$
= \left(1 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}\varepsilon\right)\psi(x, t)
$$

$$
\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\psi(x, t+\varepsilon) - \psi(x, t)}{\varepsilon}\right) = \hat{H}\psi(x, t)
$$

当 $\varepsilon \to 0$ 时，我们得到 Schroedinger 方程

$$
\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi(x, t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(x, t) \tag{8-24}
$$

至此，完成了从 Feynman 形式到 Schroedinger 形式的推导并建立起两种形式的下列对应 (表 8-1)。

**表 8-1　Feynman 形式与 Schroedinger 形式对应**

| Feynman 形式 | Schroedinger 形式 |
|---|---|
| $L(x, \dot{x}) = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x)$ | |
| 经典量 (c- 量) $H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$ | 算符 ($q$-量) $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)$ |
| $\vec{x}$ | $\vec{x}$ |
| $\vec{p}$ | $\hat{\vec{p}} = -\mathrm{i}\hbar\vec{\nabla}$ |
| $K(x, t+\varepsilon; x_0, t) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar\mathrm{i}\varepsilon}\right)^{3/2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}L(x,\dot{x})\varepsilon}$ | $K(x, t+\varepsilon; x_0, t) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}\varepsilon}\delta(x - x_0)$ |

在 Feynman 形式下，波函数按传播子方程 (8-5) 演化，而传播子用包含经典 Lagrange 和作用量的式 (8-20)、式 (8-21b) 和式 (8-21c) 来计算。在 Schroedinger 形式下，波函数按 Schroedinger 方程 (8-24) 演化，而传播子用包含 Hamilton 算子的式 (8-3)，式 (8-4) 和式 (8-23b) 来计算，Hamilton 量算符化是坐标和动量算符化的结果。正如上述对应所示, 这是微分形式所要求的。从数学的角度看，量子力学的 Feynman 形式和 Schroedinger 形式反映了物理理论的积分形式和微分形式的特点。对整体路径的积分，应用的是通常的经典物理量，变成了对局域坐标的微分后, 需要引进相应的量子物理量的算符。从物理学角度看，在整体的积分形式，用基于经典 Lagrange 的路径积分去包括真空涨落的量子效应, 而粒子力学量子化的实现表现为对所有的真空量子涨落产生的轨道的求和。在局域的微分形式，量子化是通过对粒子的坐标和动量附加量子化条件使其算符化来实现的，通过算符的量子对易关系把真空量子涨效应包括进去，二者是等价的。这样一来，Feynman 路径积分提供了一种新的量子化方法，成为规范场量子化的有力工具。Feynman 路径积分如图 8-1 所示。

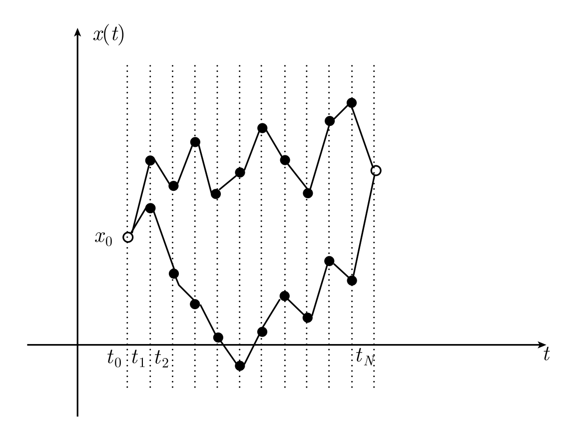



图 8-1　路径积分示意图

### 8.1.3　相空间的路径积分形式

上面讲的是量子力学在坐标空间的路径积分形式，很容易变成相位空间的路径积分形式。为此，我们从无限小传播子入手。由式 (8-23a) 的推导可知

$$
\begin{aligned}
K(x,t+\varepsilon;x',t) &= \langle x|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon\hat{H}/\hbar}|x'\rangle = \left(\frac{m}{2\pi\hbar\mathrm{i}\varepsilon}\right)^{3/2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}L(x,\dot{x})\varepsilon} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon\hat{H}/\hbar}\delta(x-x') \\
&= \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3\int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon\left(\frac{p^2}{2m}+V(x)\right)/\hbar}\cdot \mathrm{e}^{\mathrm{i}p(x-x')/\hbar}\mathrm{d}\vec{p} \\
&= \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3\int \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varepsilon\left[p\frac{x-x'}{\varepsilon}-H(x,p)\right]/\hbar}\mathrm{d}\vec{p} \\
&= \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3\int \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varepsilon L(x,\dot{x},p)/\hbar}\mathrm{d}\vec{p}
\end{aligned}
\tag{8-25}
$$

把式 (8-25) 代入式 (8-19b) 得到

$$
\begin{aligned}
K(x,t;x_0,t_0) &= C\int\prod \mathrm{d}x_n\mathrm{d}p_n\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varepsilon L(x_n,\dot{x}_n,p_n)/\hbar} \\
&= C\sum_{\text{all}\cdot\text{paths}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[x(t),x_0(t_0),\dot{x}(t),p(t)]} \\
&= \int Dx(t)Dp(t)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[x(t),x_0(t_0),\dot{x}(t),p(t)]}
\end{aligned}
\tag{8-26a}
$$

其中，

$$
S[x(t),x_0(t_0),\dot{x}(t),p(t)] = \int_{x_0(t_0)}^{x(t)}[p(t)\dot{x}(t)-H(x(t),p(t))]\mathrm{d}t \tag{8-26b}
$$

这就是传播子在相空间的路径积分表示。

由于相干态 $|\alpha\rangle$ 的连续量子数 $\alpha$ 的实部表示坐标平均值 $x$，虚部表示动量平均值 $p$，$K$ 的相干态路径积分表示与相空间的路径积分表示十分相似。把相干态 $|\alpha\rangle$ 的完备性条件插入到相干态路径的每一个片断，计算 $\hat{H}$ 在相干态表象的矩阵元，即可得到 $K$ 的相干态路径积分表示，其中，$\alpha$ 的实部与 $x$ 对应，$\alpha$ 的虚部与 $p$ 对应。

### 8.1.4 Feynman 的路径积分形式的意义

1. 整体积分形式

这表现为

(1) 波函数的时间演化用积分表达，$\psi(x,t)=\int K(x,t;x_0,t_0)\psi(x_0,t_0)\mathrm{d}x_0$;

(2) 积分核 $K(x,t;x_0,t_0)$ 是由 $\{x(t),x_0(t_0)\}$ 两点间的所有路径的整体行为决定的。

量子力学的微分形式 ——Schroedinger 形式是局域形式, 它描述量子态在时空局域的因果联系。而积分形式则是整体形式, 它描述量子态的时空整体行为。物理时空的整体性质 (如拓扑性质) 对量子态的影响只有用积分形式才能研究 (如 Aharonov–Bohm 效应，Berry 相位等, 见第 9 章)。

微分形式与积分形式的直接联系是微分形式的时间演化算子在坐标空间的矩阵元或微分形式的 Green 函数在时空坐标空间的矩阵元给出传播子

$$K(x',t';x,t)=\langle x'|\hat{U}(t',t)|x\rangle=\langle x',t'|\hat{G}|x,t\rangle \tag{8-27a}$$

$$\hat{U}(t',t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}(t'-t)/\hbar} \tag{8-27b}$$

$$\hat{G}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}-\hat{H}} \tag{8-27c}$$

2. 可以推广到量子场论

由于 Lagrange $L$ 可以表述场论系统并可写成相对论不变形式，Feynman 路径积分可以用于场的量子化，成为规范场理论量子化的有力工具。

3. 有利于研究系统的对称性

由于 $L$ 的变换不变性体现了系统的对称性和守恒定律，因此 Feynman 路径积分形式对研究系统的对称性和守恒定律特别有效，成为研究规范场约束条件的有力工具。

4. 揭示量子过程的随机性

量子力学路径积分形式不但揭示了量子过程的波动属性，而且揭示出这是一种量子涨落产生的随机波的传播。除能量动量守恒的经典轨道外，其他轨道的能量

动量是不守恒的。因此，量子过程是量子涨落产生的各种能量动量的随机波的传播、叠加的、与历史无关的 Markov 过程，正如式 (8-21a) 这一典型的 Markov 过程所示的。然而，这里是在波动层次上的随机性[3,4]，而 Nelson 形式则是在粒子坐标层次上把量子力学表述为随机的粒子的动力学过程[5]。

5. 计算传播子的 Monte–Carlo 方法

现代计算机的快速发展，使路径积分的数值计算成为可能。用 Monte–Carlo 方法计算传播子，大大扩大了量子论的运用范围。

## 8.2 量子场论的路径积分方法

从粒子的量子力学可知，在用路径积分[7,8] 计算传播子的同时，实现了对粒子力学的量子化。因此，推广到场，我们可以用它来实现场的量子化并计算场的传播子。现以自由标量场为例作一简单的介绍。

为了定义路径积分，对粒子，我们把粒子的坐标在时空上离散化。对场，我们也须把场的广义坐标 – 场函数在时空上离散化。

$$\begin{array}{cc} \text{粒子坐标在时空上离散化} & \text{场的广义坐标–场函数在时空上离散化} \\ x_i(t_i) & \varphi(x_i,t_i) \end{array} \tag{8-28a}$$

由于空间离散点是无穷的，场 $\varphi(x_i,t_i)$ 可看成无穷多粒子 (自由度) 的系统。用路径积分表示传播子可以类似地写出

$$\begin{array}{ll} \text{粒子的传播子} & \text{场的传播子} \\ K(x',t';x,t) & K(\varphi(x',t');\varphi(x,t)) \\ =\displaystyle\int\prod \mathrm{d}x_i \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum L(x_i,\dot{x}_i)\varepsilon} & =\displaystyle\int\prod_i \mathrm{d}\varphi(x_i,t_i)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum\limits_i L(\varphi_i,\dot{\varphi}_i)\Delta x\Delta t} \\ =\displaystyle\int Dx(t)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[x'(t'),x(t)]} & =\displaystyle\int D\varphi(x,t)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[\varphi(x',t'),\varphi(x,t)]} \end{array} \tag{8-28b}$$

其中，

粒子:
$$S[x'(t'),x(t)]=\int_{x(t)}^{x'(t')}L(x(t),\dot{x}(t))\mathrm{d}t \tag{8-28c}$$

场:
$$S[\varphi(x',t'),\varphi(x,t)]=\int_{\varphi(x,t)}^{\varphi(x',t')}L[\varphi(x,t),\dot{\varphi}(x,t)]\mathrm{d}x\mathrm{d}t \tag{8-28d}$$

状态的时空演化，

粒子:
$$\psi(x',t')=\int K(x',t';x,t)\psi(x,t)\mathrm{d}x \tag{8-29a}$$

场:
$$\Psi(\varphi(x',t')) = \int K(\varphi(x',t'),\varphi(x,t))\Psi(\varphi(x,t))D\varphi(x,t) \tag{8-29b}$$

如何用路径积分计算生成泛函，用生成泛函计算单 (多) 粒子 Green 函数，在量子场论中要详细讲到，这里从略。

## 8.3　统计物理中的路径积分

统计物理中配分函数的计算涉及

$$Z = \mathrm{Tr}(\mathrm{e}^{-\hat{H}\beta}) = \int \mathrm{d}x\langle x|\mathrm{e}^{-\hat{H}\beta}|x\rangle \tag{8-30}$$

其中, $\hat{H}$ 是多体系统的 Hamilton 量，$\beta = \dfrac{1}{kT}$。如对 $\beta$ 作解析延拓

$$\beta = \mathrm{i}t \tag{8-31}$$

把它看成虚时间，则 $Z$ 可以用路径积分[9] 方法计算但须对所有闭合路径求和。反之，在 $L$ 中令 $t \to -\mathrm{i}t$，则

$$L = \frac{p^2}{2m} - V(x) \quad \to \quad -\frac{p^2}{2m} - V(x) = -H \tag{8-32}$$

因此，虚时路径积分给出温度配分函数的路径积分[9] 表示。

## 参 考 文 献


[1] Feynman R P. Rev Mod Phys, 1948, 20: 367.

[2] Feynman R P, Ribbs A. Quantum Mechanics and Path Integrals. New York: McGraw Hill, 1965.

[3] Parisi G, Wu Y S. Sci Sin, 1981, 24(4): 35-48.

[4] Damgaard P H, Hueffel H. Stochastic Quantization. World Scientific Publishing, 1988.

[5] Nelson E. Phys Rev, 1966, 110(4): 1079.

[6] Goldstein H. Classical Mechanics. 2nd ed. Co:Addison-Welsley Publishing, 1980.

[7] Itzykson C，Zuber J B. Quantum Field Theory. New York: McGraw Hill Inc, 1980.

[8] 戴元本. 相互作用的规范理论. 北京：科学出版社, 1987.

[9] 郝柏林, 于渌. 统计物理学进展. 北京：科学出版社, 1981.

# 第 9 章　量子力学中的几何相位

## 9.1　引　　言

任何波动一般必须包含振幅和相位两个要素，量子力学的几率波也不能例外。因此, 量子力学波函数中的相位在理论描述中是必不可少的。这种必要性也表现在量子力学波函数一般必须是复函数, 因为复函数的三角表示正好包含振幅和相位两个要素。尽管从理论上人们从不怀疑量子力学波函数中相位的存在, 然而，长期以来，人们对它的重要性及其客观意义却缺乏深刻认识，甚至有时被忽视。

Aharonov-Bohm(AB) 效应 (1959) 和 Berry 相位 (1984) 的发现是物理学的重要成就。它促使人们对物理学基本问题，特别是量子力学几何相位问题开展深入研究。AB 效应和 Berry 相位提出了下列基本问题：

(1) 电磁理论的基本问题：电磁场强度 $(\vec{E}, \vec{B})$ 基本，还是电磁势 $A_\mu$ 基本？$A_\mu$ 是客观存在的吗？可以观测吗？

(2) 量子力学的基本问题：波函数的相位是客观存在的吗？可以观测吗？

(3) 电磁势 $A_\mu$ 与波函数的相位有什么关系？

(4) 电磁势 $A_\mu$ 和波函数的相位与物理空间的性质有关系吗？

(5) 物理空间的几何效应，除了引力效应外，还有哪些？可以观测吗？如何描述它们？

对上述问题的研究，构成了现代理论物理学的研究前沿之一，加深了人们对物理学基本问题的认识, 促成了对物理空间整体性质的认识和拓扑量子力学的发展。

## 9.2　AB 效应、AS 效应与磁通量子化

### 9.2.1　AB 效应

1959 年 Aharonov 和 Bohm 从理论上预言了 AB 效应[1]，Chambers 在 1960 年做实验证实了其存在。

考虑电子通过双缝的干涉实验，双缝后面有一细长的螺线管，如图 9-1 所示。

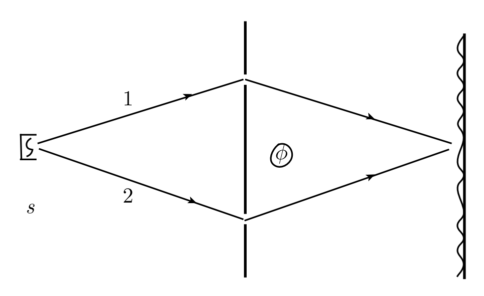



图 9-1　AB 效应实验示意图

描述上述实验的电子的 Hamilton 量和定态 Schroedinger 方程为

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\left(-\mathrm{i}\hbar\vec{\nabla}-\frac{q}{c}\vec{A}(\vec{r})\right)^2 \tag{9-1}$$

$$\hat{H}\psi(\vec{r})=E\psi(\vec{r}) \tag{9-2}$$

当 $\vec{A}=0$ 时，其解为

$$\psi_0(\vec{r})\sim \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \tag{9-3a}$$

当 $\vec{A}\neq 0$ 时，其解为

$$\psi(\vec{r})=\mathrm{e}^{\mathrm{i}S(\vec{r})/\hbar}\psi_0(\vec{r}) \tag{9-3b}$$

$$S(\vec{r})=\frac{q}{c}\int_0^{\vec{r}}\vec{A}(\vec{r})\cdot\mathrm{d}\vec{l} \tag{9-3c}$$

其中, 式 (9-3c) 中 $S(\vec{r})$ 为沿起点和终点为 $(0,\vec{r})$ 的某一路径的积分。对不同路径波函数获得的相位不同, 它们是

沿轨道 1：

$$\psi_1(\vec{r})=\mathrm{e}^{\mathrm{i}S_1(\vec{r})/\hbar}\psi_0(\vec{r}) \tag{9-4a}$$

沿轨道 2：

$$\psi_2(\vec{r})=\mathrm{e}^{\mathrm{i}S_2(\vec{r})/\hbar}\psi_0(\vec{r}) \tag{9-4b}$$

$\psi_1$ 与 $\psi_2$ 的相位差为

$$\gamma=(S_1-S_2)/\hbar=\frac{q}{c\hbar}\oint\vec{A}(\vec{r})\cdot\mathrm{d}\vec{l}=\frac{q}{c\hbar}\oiint\vec{B}\cdot\mathrm{d}\vec{\sigma}=\frac{q\phi}{c\hbar} \tag{9-5}$$

$\phi$ 为轨道 1 与轨道 2 包围的区域内的磁通，即螺线管内的磁通。$\gamma$ 具有规范不变性。事实上，在规范变换下，$\gamma$ 的确不变,

$$\vec{A}\to\vec{A}'=\vec{A}+\vec{\nabla}\alpha \tag{9-6a}$$

$$\gamma\to\gamma'=\frac{q}{c\hbar}\oint\vec{A}'\cdot\mathrm{d}\vec{l}=\frac{q}{c\hbar}\oiint[\vec{B}+\vec{\nabla}\times\vec{\nabla}\alpha]\cdot\mathrm{d}\vec{\sigma}=\gamma \tag{9-6b}$$

电子波在屏上的干涉图样由两列波 $\psi_1$ 与 $\psi_2$ 的相干强度决定，

$$\begin{aligned} I(\vec{p},\gamma) &= (\psi_1+\psi_2)^2/2 = |\psi_0(\vec{r}_1)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma}+\psi_0(\vec{r}_2)|^2/2 \\ &= 1+\frac{1}{2}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{p}\cdot(\vec{r}_1-\vec{r}_2)/\hbar+\mathrm{i}\gamma}+c.c) = 1+\cos[\vec{p}\cdot(\vec{r}_1-\vec{r}_2)/\hbar+\gamma] \end{aligned} \tag{9-7}$$

从式 (9-7) 可知, 螺线管内的磁通的变化，通过改变 $\gamma$ 可使干涉条纹发生移动。实验证实了上述理论预言。这表明，螺线管外虽然不存在磁场 $\vec{B}$，但却存在电磁势 $\vec{A}$，其大小由于规范变换而不确定，但沿路径的积分却是确定的，对波函数贡献 —— 相位，能产生物理效应。因此，在微观世界，$\vec{A}$ 比 $\vec{B}$ 更基本，与波函数相位一样，具有可观测的物理效应。应当指出，$\gamma$ 是两列波 $\psi_1$ 与 $\psi_2$ 的相位之差，不是绕一个闭合回路时电子波函数相位的变化，不存在波函数单值性的要求对磁通变化的限制 (磁通量子化) 问题，磁通可连续变化。

### 9.2.2 AS 效应

1967 年，Aharonov 和 Susskind 从理论上预言，中子经过磁场时，其自旋波函数产生进动，相位发生的变化会产生可观测的物理效应。而且由于中子自旋为 1/2，当中子进动绕回路一周时，相位变化为 π，使波函数改变一符号。这一预言在 20 世纪 70 年代也被实验证实，叫 AS 效应[2]。

如图 9-2 所示，把图 9-1 中的螺线管换成一对 N-S 磁极, 并置于轨道 1 中。

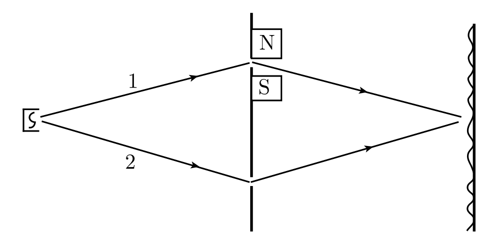



图 9-2 AS 效应实验示意图

沿轨道 1 的中子在磁场中会进动，若磁场沿 $y$-方向，则自旋波函数满足的运动方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\chi}{\partial t} = \hat{H}\chi \tag{9-8a}$$

$$\hat{H} = \mu_n\vec{B}\cdot\vec{\sigma} = \mu_n B\sigma_y = \hbar\omega\frac{\sigma_y}{2}, \quad \omega = 2\mu_n B/\hbar \tag{9-8b}$$

其中，$\mu_n$ 为中子的磁矩。考虑 $\sigma_z$ 的本征态

$$\sigma_z|m\rangle = m|m\rangle, \quad m=\pm 1 \tag{9-9}$$

初态为 $|m\rangle$ 的态的时间演化为

$$\chi_m(t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{1}{2}\sigma_y\omega t}|m\rangle$$

$$= \sum_{m'} d^{\frac{1}{2}}_{m'm}(\omega t)|m'\rangle \tag{9-10}$$

其中 $d$-函数 $d^{\frac{1}{2}}_{m'm}(\omega t) = \langle m|\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\sigma_y \omega t}|m'\rangle$, 可从函数表查到。中子的总体波函数为空间部分与自旋部分之乘积

$$\psi(\vec{r}, m) = \psi_0(\vec{r})\chi_m \tag{9-11a}$$

因为均匀磁场只引起中子自旋进动, 不影响中子在坐标空间的运动, 所以空间部分波函数为平面波

$$\psi_0(\vec{r}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \tag{9-11b}$$

控制沿轨道 1 的中子穿过磁场的时间 $\Delta t$，使

$$\gamma = \omega\Delta t = 2\pi \tag{9-12}$$

则

$$d^{\frac{1}{2}}_{m'm}(2\pi) = -\delta_{m'm} \tag{9-13a}$$

$$\chi_m(\omega\Delta t = 2\pi) = -|m\rangle \tag{9-13b}$$

沿轨道 2 的中子不穿过磁场，自旋波函数无进动，因而不变仍为 $|m\rangle$。中子在屏上的干涉图样由两列波的相干强度决定

$$I_m(\gamma = 2\pi) = \frac{1}{2}||m\rangle\psi_0(\vec{r}_1) - |m\rangle\psi_0(\vec{r}_2)|^2 = 1 + \sin\vec{p}\cdot(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)/\hbar \tag{9-14a}$$

当无磁场时，$\omega = 0$，$\gamma = 0$，

$$I_m(\gamma = 0) = \frac{1}{2}||m\rangle\psi_0(\vec{r}_1) + |m\rangle\psi_0(\vec{r}_2)|^2 = 1 + \cos\vec{p}\cdot(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)/\hbar \tag{9-14b}$$

两种情况，干涉条纹的峰谷发生移动，能清楚显示出 AS 效应。AS 效应表明自旋波函数的相位也具有物理意义。自旋在普通空间中转动一周，自旋波函数并不回到原值，而是改变符号。绕两周才回到原值, 自旋空间的角周期为 4π。这正是费米子的特征 ( 2.4.4 小节)。

### 9.2.3　磁通量子化

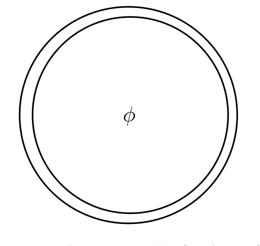



图 9-3　磁通量子化实验示意图

设电子 (或超导体中的电子对) 在一个介观圆环中运动，其电荷为 $q$。在圆环内置一个细长的螺线管，通电流后螺线管内有磁场 $\vec{B}$。管外虽无磁场，但有电磁势 $\vec{A}$, 如图 9-3 所示。与 AB 效应类似地考虑，设 $\vec{B} = 0, \vec{A} = 0$ 时，电子 (电子对) 的波函数为 $\psi_0$。当 $\vec{B} \neq 0, \vec{A} \neq 0$ 时，

$$\psi(\vec{r}) = \psi_0(\vec{r}\,)\mathrm{e}^{\mathrm{i}S(\vec{r})/\hbar} \tag{9-15a}$$

$$S(\vec{r}) = \frac{q}{c}\int_0^{\vec{r}} \vec{A}(\vec{r})\cdot \mathrm{d}\vec{l} \tag{9-15b}$$

计算一个电子 (对) 绕圆环一圈后其波函数相位的变化，得到

$$\gamma = \frac{q\phi}{c\hbar} \tag{9-16}$$

其中，$\phi$ 为磁通。由于电子 (对) 绕圆环一圈时回到空间同一点，自旋波函数 $\chi$ 未变 (因为 $B=0$, 自旋在空间无进动)，仅空间波函数相位变化 $\psi(\vec{r}) = \psi_0(\vec{r})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma}$。空间同一点总波函数的单值性要求，

$$\psi(\varphi=0) = \psi_0\chi = \psi_0\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma}\chi = \psi(\varphi=2\pi) \tag{9-17a}$$

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma}=1, \quad \gamma = 2n\pi \tag{9-17b}$$

这导致磁通量子化[3]

$$\phi = \frac{c\hbar}{q}2n\pi = n\frac{ch}{q} \tag{9-18}$$

式 (9-18) 表示，磁通以其量子 $\dfrac{ch}{q}$ 的整倍数改变，即磁通是量子化的。因此，磁通量子化是电磁势 $\vec{A}$ 与电子 (电子对) 的量子运动相互作用、相互耦合的结果，密切依赖于电子 (电子对) 的运动状态。在 AB 效应中，涉及两列电子波的相干，磁通可以连续变化，并不量子化。而在此处，涉及电子 (电子对) 的稳定的定态运动，电子 (电子对) 波函数的单值性导致磁通量子化。

上面讲的是物理空间存在电磁势 (场) 时，使带电粒子或具有磁矩的中性粒子的波函数在坐标空间或自旋空间产生了一个附加的相位，导致可观测的物理效应。这表明 $A_\mu$ 更基本;$A_\mu$ 与带电粒子耦合产生的波函数的相位具有可观测的物理效应。

当 Hamilton 量包含与时间有关的参数时，其本征态仿射的 Hilbert 空间以参数空间为底空间, 态矢沿弯曲的参数底空间平移时也会产生附加的相位，导致可观测的物理效应。

一般地，当与量子系统及其态矢耦合的物理因素周期性变化时，都有可能使波函数产生附加相位，导致可观测的物理效应。

## 9.3 Berry 相 位

具有 Berry 相位[4-8] 的量子系统的 Hamilton 量必须依赖时间，这类系统称为非自治量子系统。很多用变化外场控制的人造量子系统都是非自治系统，而且多数

具有代数结构，可以用代数动力学的求解，进而计算它们的各种几何相位。这方面的内容可见第二部分第 14 章。

### 9.3.1　含时 Hamilton 量的瞬时本征值问题

量子系统与外界可变环境相互作用，可以用包含若干含时参数的 Hamilton 量来描述，

$$\hat{H}(\vec{r},t)=\hat{H}(\vec{r},\vec{R}(t)),\quad \vec{R}(t)=\{R_i(t),i=1,\cdots,n\} \tag{9-19}$$

其中，$\vec{r}$ 是粒子坐标，$\vec{R}(t)$ 是参数空间的矢量与时间有关。这样的系统称非自治量子系统。

该系统的瞬时本征态方程为

$$\hat{H}(\vec{R}(t))|n(\vec{R})\rangle=E_n(\vec{R})|n(\vec{R})\rangle \tag{9-20a}$$

其解 $E_n(\vec{R}),|n(\vec{R})\rangle$ 依赖参数 $\vec{R}$，$|n(\vec{R})\rangle$ 满足正交、归一、完备性条件，即

$$\langle m(\vec{R})|n(\vec{R})\rangle=\delta_{mn} \tag{9-20b}$$

$$\sum_n|n(\vec{R})\rangle\langle n(\vec{R})|=I \tag{9-20c}$$

对式 (9-20a) 和式 (9-20b) 施行 $\vec{R}$ 空间的梯度运算可得

$$E_m\langle m|\vec{\nabla}n\rangle+\langle m|\vec{\nabla}\hat{H}|n\rangle=E_n\langle m|\vec{\nabla}n\rangle \tag{9-21a}$$

$$\langle m|\vec{\nabla}n\rangle=\langle m|\vec{\nabla}\hat{H}|n\rangle/(E_n-E_m) \tag{9-21b}$$

$$\langle\vec{\nabla}m|n\rangle+\langle m|\vec{\nabla}n\rangle=0 \tag{9-22a}$$

$$\langle\vec{\nabla}m|n\rangle=-\langle m|\vec{\nabla}n\rangle \tag{9-22b}$$

上述各种量都是 $\vec{R}(t)$ 的函数，$\langle m|\vec{\nabla}n\rangle$ 等是 $\vec{R}$ 空间的矢量。

### 9.3.2　含时量子系统的时间演化

该系统的时间有关的 Schroedinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle=\hat{H}(\vec{R}(t))|\psi(t)\rangle \tag{9-23}$$

可在瞬时本征态 $|n(\vec{R}(t)\rangle$ 表象中求解。令

$$|\psi(t)\rangle=\sum_n a_n(t)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t E_n(\vec{R}(\tau))\mathrm{d}\tau}|n(\vec{R}(t)\rangle \tag{9-24a}$$

代入式 (9-23)，左乘 $\langle n(\vec{R}(t))|$ 并利用正交、归一性条件 (9-20b) 可得

$$\begin{aligned}\dot{a}_n(t) =& -a_n(t)\langle n(\vec{R}(t))|\frac{\partial}{\partial t}n(\vec{R}(t))\rangle \\ &- \sum_{m\neq n} a_m(t)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t[E_n(\tau)-E_m(\tau)]\mathrm{d}\tau}\langle n(\vec{R}(t))|\frac{\partial}{\partial t}m(\vec{R}(t))\rangle \\ =& -a_n(t)\langle n(\vec{R}(t))|\frac{\partial}{\partial t}n(\vec{R}(t))\rangle \\ &- \sum_{m\neq n} a_m(t)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t[E_n(\tau)-E_m(\tau)]\mathrm{d}\tau}\dot{\vec{R}}\langle n(\vec{R}(t))|\vec{\nabla}m(\vec{R}(t))\rangle \\ =& -a_n(t)\langle n(\vec{R}(t))|\frac{\partial}{\partial t}n(\vec{R}(t))\rangle \\ &- \sum_{m\neq n} a_m(t)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t[E_n(\tau)-E_m(\tau)]\mathrm{d}\tau}\frac{\dot{\vec{R}}\cdot\langle n(\vec{R}(t))|\vec{\nabla}\hat{H}|m(\vec{R}(t))\rangle}{E_n(\vec{R}(t))-E_m(\vec{R}(t))}\end{aligned} \tag{9-24b}$$

在式 (9-24b) 的推导中，用到式 (9-21b) 和式 (9-24c) 表示的复合函数的微商

$$\frac{\partial}{\partial t} = \dot{\vec{R}}\cdot\vec{\nabla} \tag{9-24c}$$

式 (9-24b) 仍是严格的，与式 (9-23) 等价。

### 9.3.3 绝热近似

式 (9-24b) 的第二项代表参数变化 ($\dot{\vec{R}}\neq 0$) 导致的绝热能级 $|m\rangle\rightarrow|n\rangle$ 跃迁的贡献，正比于参数变化率 $\dot{\vec{R}}$ 与 Hamilton 量在参数空间的梯度 $\vec{\nabla}\hat{H}(\vec{r},\vec{R})$ 的内积。当参数变化率与绝热能级跃迁频率相比十分缓慢，且满足

$$\left|\frac{\dot{\vec{R}}\cdot\langle n(\vec{R}(t))|\vec{\nabla}\hat{H}|m(\vec{R}(t))\rangle}{E_n(\vec{R}(t))-E_m(\vec{R}(t))}\right| \ll \left|\langle n(\vec{R}(t))\left|\frac{\partial}{\partial t}n(\vec{R}(t))\right\rangle\right|$$

或

$$|\dot{\vec{R}}|/|\vec{R}| \ll \omega_{nm} = |E_n(\vec{R})-E_m(\vec{R})|/\hbar \tag{9-25}$$

(因为 $|\langle\vec{\nabla}\hat{H}\rangle| \sim |\langle\hat{H}\rangle|/|\vec{R}| \sim |\langle|\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\rangle|/|\vec{R}|$) 时，第二项绝热能级 $|m\rangle\rightarrow|n\rangle$ 的跃迁可以略去，因而有绝热近似

$$\dot{a}_n(t) = -a_n(t)\langle n(\vec{R}(t))|\frac{\partial}{\partial t}n(\vec{R}(t))\rangle \tag{9-26}$$

式 (9-26) 的解为

$$a_n(t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma_n(t)}a_n(0) \tag{9-27a}$$

$$\gamma_n(t) = -\mathrm{i}\int_0^t \mathrm{d}t'\langle n(\vec{R}(t'))|\frac{\partial}{\partial t'}n(\vec{R}(t'))\rangle \tag{9-27b}$$

当初始时刻系统处于绝热能级 $|n\rangle$, 则相应的初始条件 $a_n(0)=1$ 的解为

$$\psi_n(t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma_n(t)}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t\mathrm{d}\tau E_n(\vec{R}(\tau))}|n(\vec{R}(t))\rangle=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\gamma_n(t)+\gamma_n^d(t))}|n(\vec{R}(t))\rangle \tag{9-28a}$$

$$\gamma_n^d(t)=\frac{1}{\hbar}\int_0^t\mathrm{d}\tau E_n(\vec{R}(\tau)) \tag{9-28b}$$

从式 (9-22b) 知 $\langle n(\vec{R}(t))|\dfrac{\partial}{\partial t}n(\vec{R}(t))\rangle$为纯虚数，故 $\gamma_n(t)$ 为实，称为 Berry 相位或绝热几何相位。而 $\gamma_n^d(t)$ 称为动力学相位，二者之和 $\phi_n(t)$

$$\phi_n(t)=\gamma_n(t)+\gamma_n^d(t) \tag{9-28c}$$

称为总相位。

### 9.3.4　绝热 Berry 相位

Berry 在上述绝热近似下计算几何相位，叫绝热 Berry 相位。他考虑 $\vec{R}(t)$ 是 $t$ 的周期函数的情况：$\vec{R}(T)=\vec{R}(0)$。在一个周期内，$\vec{R}(t)$ 在参数空间沿闭合轨道 $C$ 走一圈，Berry 相位为

$$\gamma_n(C)=-\mathrm{i}\int_0^T\mathrm{d}t\frac{\mathrm{d}\vec{R}(t)}{\mathrm{d}t}\langle n(\vec{R}(t))|\vec{\nabla}_R n(\vec{R}(t))\rangle \tag{9-29a}$$

$$=-\mathrm{i}\oint\mathrm{d}\vec{R}\cdot\langle n(\vec{R})|\vec{\nabla}_R n(\vec{R})\rangle=\oint\mathrm{d}\vec{R}\cdot\vec{A}_n(\vec{R}) \tag{9-29b}$$

其中 $\vec{A}_n(\vec{R})$ 为波函数在 $\vec{R}$ 空间变化时诱导出的规范势，其定义为

$$\vec{A}_n(\vec{R})=-\mathrm{i}\langle n(\vec{R})|\vec{\nabla}_R n(\vec{R})\rangle \tag{9-29c}$$

若 $\vec{R}$ 空间是三维的，利用 Stokes 定理有

$$\gamma_n(C)=\oiint_S\mathrm{d}\vec{S}\cdot\vec{B}_n(\vec{R}) \tag{9-30a}$$

$S$ 是 $C$ 所包围的曲面，$\vec{B}_n(\vec{R})$ 是诱导的 $\vec{R}$ 空间中的规范场，定义为

$$\vec{B}_n(\vec{R})=\vec{\nabla}_R\times\vec{A}_n(\vec{R}) \tag{9-30b}$$

$\vec{A}_n(\vec{R})$ 是诱导规范场的矢量，$\vec{B}_n(\vec{R})$ 是磁场强度，$\gamma_n(C)$ 由 $C$ 所包围的曲面 $S$ 的“磁通”决定。下面将看到，当 $\vec{R}$ 空间存在“磁单极”或 $C$ 包围着像螺线管一样的“磁力线”时曲面 $S$ 的“磁通”。因而 Berry 相位 $\gamma_n(C)$ 不为零。

另外，“磁场”强度 $\vec{B}_n(\vec{R})$ 与能级交叉有关。为此，进一步计算 $\vec{B}_n(\vec{R})$

$$(\vec{B}_n(\vec{R}))_i=(\vec{\nabla}_R\times\vec{A}_n(\vec{R}))_i=-\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\partial_j\langle n(\vec{R})|\partial_k n(\vec{R})\rangle$$

$$= -\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\langle\partial_j n(\vec{R})|\partial_k n(\vec{R})\rangle = -\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\sum_m \langle\partial_j n(\vec{R})|m(\vec{R})\rangle\langle m(\vec{R})|\partial_k n(\vec{R})\rangle$$

$$= -\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\sum_{m\neq n}\frac{\langle n(\vec{R})|\partial_j H(\vec{R})|m(\vec{R})\rangle\langle m(\vec{R})|\partial_k H(\vec{R})|n(\vec{R})\rangle}{(E_n(\vec{R})-E_m(\vec{R}))^2} \tag{9-31a}$$

$$= \mathrm{Im}\sum_{m\neq n}\frac{(\langle n(\vec{R})|\vec{\nabla}_R H(\vec{R})|m(\vec{R})\rangle\times\langle m(\vec{R})|\vec{\nabla}_R H(\vec{R})|n(\vec{R})\rangle)_i}{(E_n(\vec{R})-E_m(\vec{R}))^2} \tag{9-31b}$$

$$\vec{B}_n(\vec{R}) = \mathrm{Im}\sum_{m\neq n}\frac{\langle n(\vec{R})|\vec{\nabla}_R H(\vec{R})|m(\vec{R})\rangle\times\langle m(\vec{R})|\vec{\nabla}_R H(\vec{R})|n(\vec{R})\rangle}{(E_n(\vec{R})-E_m(\vec{R}))^2} \tag{9-32}$$

式 (9-32) 的推导用到 $\varepsilon_{ijk}$ 的反对称性以及式 (9-21b)、式 (9-22b)。式 (9-32) 表现了能级交叉的奇异性对应的 “磁荷” 产生 “磁场” 的过程。

### 9.3.5 自旋为 1/2 的粒子在转动磁场中的运动

该系统的 Hamilton 量为

$$H(\vec{R}(t)) = -\mu\vec{\sigma}\cdot\vec{R}(t) = -\mu[\sigma_x X(t)+\sigma_y Y(t)+\sigma_z Z(t)] \tag{9-33a}$$

三维空间的转动磁场为

$$\begin{aligned}\vec{R}(t) &= R(\sin\theta\cos\phi(t),\sin\theta\sin\phi(t),\cos\theta)\\ &= (X(t),Y(t),Z(t))\end{aligned} \tag{9-33b}$$

$$R = (X^2+Y^2+Z^2)^{1/2} \tag{9-33c}$$

瞬时绝热本征能量为

$$|-\mu\vec{\sigma}\cdot\vec{R}-E| = 0 \tag{9-34a}$$

$$\begin{vmatrix} Z-E & X-\mathrm{i}Y \\ X+\mathrm{i}Y & -Z-E \end{vmatrix} = 0 \tag{9-34b}$$

$$E_m(\vec{R}) = m\mu R (m=\pm 1) \tag{9-34c}$$

现计算 Berry 相位, 由于

$$\vec{\nabla}_R H(\vec{R}) = -\mu\vec{\sigma} \tag{9-35}$$

计算矩阵元时，令 $\vec{R}$ 为 $z$ 方向，则式 (9-33a) 的本征解为 $\sigma_z$ 的本征解 $|m=\pm\rangle = |\pm\rangle$, 且有

$$\sigma_z|\pm\rangle = \pm|\pm\rangle, \quad \sigma_x|\pm\rangle = |\mp\rangle, \quad \sigma_y|\pm\rangle = \pm\mathrm{i}|\mp\rangle \tag{9-36a}$$

$$\langle m|m'\rangle = \delta_{mm'} \tag{9-36b}$$

$$
\begin{aligned}
&\langle +|\vec{\nabla}_R H|-\rangle \times \langle -|\vec{\nabla}_R H|+\rangle \\
=&\mu^2[\langle +|\vec{\sigma}|-\rangle \times \langle -|\vec{\sigma}|+\rangle] \\
=&\mu^2[\vec{e}_x(\langle +|\sigma_y|-\rangle\langle -|\sigma_z|+\rangle - \langle +|\sigma_z|-\rangle\langle -|\sigma_y|+\rangle) \\
&+\vec{e}_y(\langle +|\sigma_z|-\rangle\langle -|\sigma_x|+\rangle - \langle +|\sigma_x|-\rangle\langle -|\sigma_z|-\rangle) \\
&+\vec{e}_z(\langle +|\sigma_x|-\rangle\langle -|\sigma_y|+\rangle - \langle +|\sigma_y|-\rangle\langle -|\sigma_x|+\rangle)] \\
=&\mu^2(0\vec{e}_x + 0\vec{e}_y + 2\mathrm{i}\vec{e}_z) \qquad (9\text{-}37\mathrm{a}) \\
=&2\mathrm{i}\mu^2\frac{\vec{R}}{R}\langle -|\vec{\nabla}_R H|+\rangle \times \langle +|\vec{\nabla}_R H|-\rangle \\
=&\mu^2[\langle -|\vec{\sigma}|+\rangle \times \langle +|\vec{\sigma}|-\rangle] \\
=&\mu^2(0\vec{e}_x + 0\vec{e}_y - 2\mathrm{i}\vec{e}_z) = -2\mathrm{i}\mu^2\frac{\vec{R}}{R} \qquad (9\text{-}37\mathrm{b})
\end{aligned}
$$

$$
(E_+(\vec{R}) - E_-(\vec{R}))^2 = 4\mu^2 R^2 \qquad (9\text{-}38)
$$

从式 (9-32) 得到两个能级对应的“磁单极”产生的“磁场”

$$
\vec{B}_+ = +\frac{\vec{R}}{2R^3} \qquad (9\text{-}39\mathrm{a})
$$

$$
\vec{B}_- = -\frac{\vec{R}}{2R^3} \qquad (9\text{-}39\mathrm{b})
$$

式 (9-39) 相位于原点 ($R=0$) 的磁单极产生的磁场。由此可得

$$
\gamma_\pm(C) = \oint_S \mathrm{d}\vec{S}\cdot\vec{B}_\pm(\vec{R}) = \pm\frac{1}{2}\varOmega(C) \qquad (9\text{-}40\mathrm{a})
$$

$\varOmega(C)$ 为从 $R=0$ 看曲线 $C$ 所张的立体角。容易算出

$$
\varOmega(C) = 2\oiint_S |\mathrm{d}\vec{S}\cdot\vec{B}| = \oiint_S \mathrm{d}\varOmega R\vec{R}\cdot\frac{\vec{R}}{R^3} = \int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\int_0^\theta \sin\theta\mathrm{d}\theta = 2\pi(1-\cos\theta) \qquad (9\text{-}40\mathrm{b})
$$

计算 Hamilton 量 (9-33) 的绝热 (瞬时) 本征解后，再用式 (9-27b) 计算 $\gamma_\pm$ 给出同样的结果。

### 9.3.6 非绝热 Berry 相位

前面的 Berry 相位是在绝热近似下计算。如果不考虑绝热近似，如何计算非绝热 Berry 相位？

从式 (9-28c) 可知，Berry 相位可从总相位和动力学相位计算

$$
\gamma_n(t) = \phi_n(t) - \gamma_n^d \qquad (9\text{-}41\mathrm{a})
$$

$$\gamma_n^d(t) = \frac{1}{\hbar}\int_0^t \mathrm{d}\tau E_n(\vec{R}(\tau)) \tag{9-41b}$$

式 (9-41) 便于推广到非绝热情况，计算非绝热 Berry 相位[9−11]。此时，$|n(t)\rangle$ 应是时间有关 Schroedinger 方程的精确解 (而非绝热解)，而 $E_n(t)$ 是 $H(t)$ 在该态上的平均值

$$E_n(t) = \langle n(t)|H(t)|n(t)\rangle \tag{9-41c}$$

对周期性变化的 Hamilton 量 $H(t)$，容易计算一个周期的 $\phi_n(T)$ 和 $\gamma_n^d(T)$，由式 (9-41a) 得非绝热 Berry 相位。具体例子见第二部分第 14 章。

### 9.3.7 非绝热非周期性几何相位——— Pancharatnam 几何相位

上面介绍的非绝热几何相位是在系统周期性演化中计算的，称周期性非绝热几何相位。Pancharatnam 定义了非绝热非周期性光路中光波的相位比较。推广到量子力学, 可以定义非绝热非周期性几何相位，叫 Pancharatnam 几何相位[12,13]。设系统的初态波函数为 $\psi(t_0)$, 按照 Schroedinger 方程演化到时刻 $t$ 的波函数为 $\psi(t)$, 对初态波函数的相位增量定义为

$$\phi_{\text{pan}}(t_0 \to t) = \arg\langle\psi(t)|\psi(t_0)\rangle \tag{9-42a}$$

从 Hamilton 量对该波函数的平均值可计算动力学相位

$$\gamma^d(t_0 \to t) = \frac{1}{\hbar}\int_{t_0}^t \langle\psi(\tau)|H(\tau)|\psi(\tau)\rangle \mathrm{d}\tau \tag{9-42b}$$

Pancharatnam 几何相位定义为

$$\gamma_{\text{pan}}(t_0 \to t) = \phi_{\text{pan}}(t_0 \to t) - \gamma^d(t_0 \to t) \tag{9-42c}$$

研究表明 Pancharatnam 几何相位比 Berry 相位更一般, 除了按式 (9-27b) 计算的贡献外, 还有额外的部分。

### 9.3.8 几何相位的量子经典对应———Hannay 角

如果一个非自治量子系统有经典对应, 则量子系统的几何相位也有经典对应。对于绝热的周期性演化, 量子系统的几何相位的经典对应是 Hannay 角[14,15]: 在经典非自治系统的绝热的动力学演化中, 系统参数随时间的变化也会在作用量对应的角变量中产生一个附加的几何增量——Hannay 角 $\theta_H$, 它与 Berry 相位 $\gamma(I)$ 的关系是

$$\theta_H = \frac{\partial\gamma(I)}{\partial I} \tag{9-43}$$

其中，$I$ 是作用量运动常数 (量子数)。

量子系统的几何相位的研究已成为物理学的一个重要前沿。在原子分子物理、量子光学、凝聚态物理和核物理等学科的研究中, 量子几何相位的存在已获得实验的证实, 并开始获得应用。特别是近年来, 人们正研究如何利用量子几何相位作成具有抗环境辐射动力学退相干效应的量子逻辑门。

## 9.4 物理空间的几何效应与规范场

### 9.4.1 物理空间

物理空间是存在电磁场、引力场、其他物理场或物理介质的空间, 是真空加上局部区域存在的物理场或物理介质。这种物理空间的性质不同于真空。AB 效应、AS 效应、Berry 相位等是由于物理空间在局部区域存在物理场或物理介质，造成波函数 (Hilbert 空间) 的参数底空间弯曲，当波函数在参数空间强迫平移一周时，产生了几何效应。这是参数空间的几何属性在量子态上的表现[5,6,16−18]。

### 9.4.2 诱导规范场

物理空间的几何效应是通过 Hamilton 量的参数的绝热变化，使其本征矢仿射的 Hilbert 空间的参数空间弯曲，又通过式 (9-29c)、式 (9-30b) 诱导出规范势和规范场，这一规范场使波函数产生一几何相位，其数值由波函数在参数空间经历的曲线所张的立体角决定。

### 9.4.3 Hilbert 空间的参数空间的弯曲及其几何效应的描述

波函数的参数空间弯曲及其几何效应，可以用纤维从理论描述。参数空间是底空间，波函数或其相位为纤维从。例如，

AB 效应：$U(1)$ 主丛 (线丛)；相位角 $\gamma : 0 \sim 2\pi$; (9-44)

AS 效应：$Z_2$ 主丛; 相位角 $\gamma = 2\pi, 4\pi$; $e^{i\frac{\gamma}{2}} = \mp 1$ (9-45)

### 9.4.4 经验与教训

量子力学几何相位的物理效应表明我们对量子力学本质的认识仍然是不深的，量子现象还蕴藏着许多宝藏等待我们去发掘。物理空间的几何效应除引力场外，还有许多别的现象。

## 参 考 文 献

[1] Aharonov Y, Bohm D. Phys Rev, 1959, 115: 485; Chambers R G Phys Rev, 1960, 5: 3.

[2] Aharonov Y, Susskind L S. Phys Rev, 1967, 158: 1237.

[3] 葛墨林. 量子力学的前沿问题. 北京：清华大学出版社, 2000: 278.
[4] Berry M V. Roy Soc, 1984, A392: 45.
[5] Simon B. Phys Rev Lett, 1983, 51:2167.
[6] Wilczeck F, Zee A. Phys Rev Lett, 1984, 52: 2111.
[7] Chiao E Y, Wu Y S. Phys Rev Lett, 1986, 57: 933.
[8] Tomita A, Chiao R Y. Phys Rev Lett, 1986, 57: 937.
[9] Aharonov Y, Anandan J. Phys Rev, 1987, 58: 1593.
[10] Wang S J. Phys Rev, 1990, A42: 5103.
[11] Wang S J. Phys Rev, 1990, A42: 5107.
[12] Samuel J, Bhandari R. Phys Rev Lett, 1988, 60: 2339.
[13] Pancharatnam S. Proc Indian Acad Sci, 1956, A4: 247.
[14] Hannay J H. J Phys, 1985, A18.
[15] Anandan J. Phys Lett, 1988, A129: 201.
[16] Shapere A, Wilczek F. Geometric Phase in Physics. Singapore: World Scientific, 1989.
[17] 李华钟. 简单物理系统的整体性. 上海：上海科学技术出版社，1998.
[18] David J, Thouless J. Topological Quantum Numbers in Non-relativistic Physics. Singapore: World Scientific, 1988.

# 第10章　量子力学前沿问题

作为现代物理学理论支柱之一的量子论, 自 Planck 1900 年发现量子算起, 已经有 110 多年的历史, 而自 1925 年量子力学诞生以来, 已经历了 87 年。这是一门深刻而成熟的学问, 又是一门底蕴神秘、丰富, 不断引发新发现的科学。可以说, 人们对量子论的应用知之甚多, 而对量子论的本质的了解却又知之甚少。量子论的神秘的深层，蕴藏着丰富的宝藏, 由此不断诱发出新的发现与发展。量子论的发展表现在两个方面: 第一, 它在广泛的应用中使自身得到发展; 第二, 它的神秘的深层本质被逐步揭示出来, 使理论本身得到质的飞跃。第一方面的发展经常展现在人们面前；而第二方面的发展却是缓慢的, 艰苦而罕见的, 也是震撼人心的。

前面 9 章, 我们介绍了量子论的基本理论和它在现代物理学几个领域的应用中的主要理论方法, 特别是量子多体理论方法。在我们目前的理解水平上, 也阐述了量子论作为描述真空量子涨落效应的理论本质, 还介绍了量子力学的一些前沿进展。本章将简要介绍量子力学在广泛的应用中的更多的前沿问题和涉及量子论本质的一些领域, 以作为前 9 章的补充。由于量子力学前沿问题内容十分丰富, 已有不少专著介绍这一领域, 我们在本章中只提出一些课题并对之做摘要性的介绍。建议有兴趣的读者, 根据后面列出的专著文献, 自己研读这些问题, 作为学习这门课程的重要补充。

本章列出的问题可能是挂一漏万, 读者可以根据自己的兴趣研究更重要而有趣的课题。下面, 我们对列出的问题做摘要性的介绍, 指出其实质与要点, 供读者自学研读时参考。

## 10.1　量子 Hall 效应

电子在 (恒定) 强磁场中的量子运动, 致使电子运动的 Landau 能级量子化和简并，加之系统中杂质粒子的局域电子态的存在, 导致 Hall 电阻的量子化 (阶梯式不连续变化)[1-3]。

## 10.2　Bose-Einstein 凝聚

大量的 ($10^3 \sim 10^5$ 个) 束缚在磁光阱中的中性玻色子型的原子在极低温度下 ($T = n$K) 填充最低量子能态，形成宏观可观测的集体的量子态的凝聚现象, 叫做

BEC。束缚中性玻色子型原子的陷阱有磁阱 (利用不均匀磁场对粒子磁矩产生的作用力)、激光阱 ( 利用不均匀激光电场对原子电偶极矩产生的作用力) 或二者的结合磁光阱。BEC 有各种激发，可用 Gross–Pitaevskii(非线性 Schroedinger) 方程 (或进一步用 Bogoliubov 近似) 描述，BEC 可用于精密测量、原子激光、光子信息的储存与加工等[1-3]。

## 10.3 Josephson 效应

被 (外部或内部的) 位垒分隔开的两部分玻色子凝聚体之间会出现位垒穿透效应; 对超导体中的 Cooper 电子对的这种位垒穿透, 会形成振荡的电流, 称为 Josephson 效应[1-3]。Josephson 效应已用于极精密的电磁测量。

## 10.4 van der Waals 力与 Casimir 效应

①真空的电磁场量子涨落会诱导出中性原子的电偶极矩涨落, 造成原子的电偶极矩之间的相互作用, 产生 van der Waals 力；②真空被两块平行金属板分割，导致不同区域内真空的电磁场量子涨落模式的差别。两块平行金属板之间的电磁真空由于受限, 其真空电磁场量子涨落模式的数目比起两块平行金属板外部区域要少, 因而平行板外部的真空电磁场量子涨落压强大于两块平行金属板之间的真空电磁场量子涨落压强, 在金属板之间产生 Casimir 吸引力。实验上已经成功地测得了这种力，证实了 Casimir 效应的存在[1-3]。

## 10.5 Bell 定理与实验验证

量子涨落的测不准关系和量子态的非定域性体现了量子力学的本质特征，Bell 考虑到决定论的经典力学与或然性的量子力学的本质区别, 用定理的形式 (Bell 不等式) 来严格区分两类力学。实验对 Bell 不等式的验证[1−3], 证明了量子力学理论体系的完备性，肯定了不存在比现有量子论更精细的、基于隐参数的、非或然性的量子理论。

## 10.6 量子态纠缠与退相干

多体系统中粒子之间的相互作用和全同性原理, 造成多粒子量子态之间的动力学关联与全同性关联，其结果是多粒子系统的量子态不可能表示成每个单粒子量子态的乘积, 而只能是若干个单粒子乘积态的线性叠加。多粒子系统量子态的上述

性质叫做量子纠缠。环境的扰动或测量过程，会使多粒子量子态之间的纠缠、关联和相干消失造成退相干[1,4−6]。量子纠缠，特别是宏观尺度上的量子纠缠是量子信息和量子通信的物理基础, 也是量子论最神秘之处, 其物理本质有待澄清。

## 10.7 拓扑量子力学

存在物质介质或物理场的物理空间或其边界的拓扑性质会对粒子的量子运动造成影响, 出现与物理空间拓扑性质有关的量子数–拓扑量子数[7−9]。与依赖于系统 Hamilton 量和 Lagrange 的对称性的量子数不同, 拓扑量子数是由物理空间的整体几何性质决定的, 是抗动力学干扰的。

## 10.8 量子信息与量子通信

①用二能级量子系统的两个状态及其叠加态作成一个量子比特去存储信息，用量子力学动力学演化进行信息处理、加工与传递，这种基于量子态和量子力学运动规律的信息论叫做量子信息论；②用宏观上非定域的、纠缠的量子态进行信息传递叫做量子通信[4−6]。

## 10.9 量子编码与量子计算

①用量子态荷载 (记载) 信息，把量子信息用符号表示，把量子信息源的符号集与编码符号集一一对应起来, 叫做量子编码; ②把数量信息用量子态表示，通过量子力学动力学演化，在量子态的动力学变化中，实现了量子态所包含的数字信息的运算与加工，再从运算后的量子态中提取出运算后的数量信息结果, 叫做量子计算[4−6]。

## 参 考 文 献

[1] 张礼，葛墨林. 量子力学的前沿问题. 北京：清华大学出版社，2000.
[2] 曾谨言. 量子力学前沿问题. 北京：科学出版社，2000.
[3] 曾谨言，龙桂鲁，裴寿镛. 量子力学新进展. 北京：清华大学出版社，2003.
[4] 李承祖，黄明球，陈平行，等. 量子通讯与量子计算. 北京：国防科技大学出版社，2000.
[5] 戴葵, 宋辉, 刘芸, 等. 量子信息技术引论. 北京：国防科技大学出版社，2001.
[6] Nielsen M A，Chuang I L. Quatum Computation and Quantum Information. New York: Cambridge University Press, 2000.
[7] 李华钟. 简单物理系统的整体性. 上海：上海科学技术出版社，1998.

[8] Shapere A，Wilczek F. Geometric Phase in Physics. Advances Series in Mathematics, 1989, 5.

[9] David J, Thouless J. Topological Quantum Numbers in Non-relativistic Physics. Singapore: World Scientific, 1988.

# 第 11 章　量子力学问题的分类

在学习了高等量子论和量子多体理论的基本内容之后, 本章从更广阔的视野来审视量子力学的基本问题, 以便对量子力学的研究领域有一个全面的了解。量子力学基本问题可以从不同角度去考察, 下面从八个方面对问题进行分类。这些分类反映出作者对量子论基本问题的看法，具有很强的个人观点特征，因此，仅供读者参考。

## 11.1　按照系统的动力学性质的分类

按照系统的动力学性质，量子力学的基本问题可分为结构问题、结构不稳定性问题即衰变、裂变问题以及引起结构变化的碰撞和反应问题。结构问题是负能、结合态、间断能谱问题; 碰撞和反应问题是正能、非结合态、连续能谱问题; 结构不稳定性问题介于二者之间, 其特点是间断能谱与连续能谱的交织与耦合, 是量子多体系统特有的现象。从系统论的观点看, 碰撞和反应问题属于系统的功能问题, 与结构问题的关系是结构决定功能, 功能改变结构。系统的内部结构决定了它对外界作用 (碰撞) 能产生什么样的反应, 而通过碰撞和反应却又能够改变系统的结构。无论结构问题, 还是碰撞和反应问题, 理论处理时都有一体问题 (二体问题可化为一体问题) 和多体问题之分, 其中最难处理的是少体问题。一体 (二体) 问题可以解析或数值求解, 多体问题可以通过平均场近似, 化为单体问题 (独立粒子运动近似), 然后再进一步处理剩余作用引起的量子态跃迁与组态混合。除了少体问题难于处理外, 结构不稳定性问题, 强作用下的衰变与裂变问题以及间断能谱与连续能谱的

I
- 结构问题：负能、结合态、间断能谱
  - 一体、二体问题：解析解或数值解
  - 多体问题
    - 平均场
      - 化多体问题为单体问题
      - 独立粒子运动近似
    - 剩余作用量子态跃迁与组态混合
- 结构不稳定性问题：衰变与裂变
  (多体问题，间断能谱与连续能谱的交织与耦合)
- 碰撞–反应问题：正能、非结合态、连续能谱
  (功能问题)
  二者关系：结构决定功能, 功能改变结构
  - 一体、二体问题：数值解或解析解
  - 多体问题
    - 平均场
      - 化多体问题为单体问题
      - 光学模型：散射与吸收
    - 剩余作用：转移粒子，改变结构

交织与耦合问题, 也是极难处理的问题, 至今仍缺乏精确的理论方法。上述对量子力学这一问题的阐述与分类可以简要地总结于上表 I.

## 11.2　按照认识论路线的分类

量子力学理论问题按认识论路线可分为正问题和逆问题。量子力学的正问题是给定系统的 Hamilton 量，计算出本征值问题和散射与反应问题的所有数据。上述问题的逆问题是给出一组充分和必要的数据，构造出一个 Hamilton 量能产生这些数据。在本征值问题的逆问题中 (只是逆问题的一个部分)，输入的数据是本征能量 $\{E_n\}$ 和本征波函数 $\{\psi_n\}$，它们代表问题的现象学方面，包含的信息量是非常大的。相反，由上述数据求出的 Hamilton 量却代表着问题的本质方面，即寻找支配现象的自然定律的方面，它包含的信息量却比较少。正问题求解的思路是演绎的，从 Hamilton 量出发推导出各种数据，这是一个信息量扩张的过程。而逆问题的思路则相反，是归纳的，从大量的现象学数据抽象出自然定律 ——Hamilton 量，这是一个信息量压缩的过程。

量子力学的正问题的解答比起逆问题的解答来说, 要容易得多, 人们已发展出许多切实可行的求解方法, 包括结合态本征值和碰撞反应问题的求解方法。当然, 正问题这一领域还存在一些疑难问题有待人们去解决, 如前面指出的结构不稳定性问题, 间断能谱与连续能谱的交织与耦合问题以及强耦合非微扰处理问题等。但是, 相比之下, 求解逆问题的理论方法发展就不很充分。即使对于势场散射的逆问题的求解发展出反散射方法, 也多停留于原理阐述阶段, 少有对复杂的实际问题的精确解答。然而, 近年来, 针对实际逆问题求解的需要, 发展了以唯象数据分析为补充的不完全的逆问题求解方法, 取得了一些有实际意义的成果。正问题与逆问题的求解路线, 可简要地总结于下表。

$$
\text{II}\left\{\begin{array}{l}
\text{正问题}\hat{H}\left\{\begin{array}{l}
\text{结构}\{E_n,\psi_n\} \\
\text{碰撞反应}\left\{\text{相移}\delta_{lJ}(E),\text{截面}\dfrac{\mathrm{d}\sigma_{\beta\alpha}(\theta,\varphi)}{\mathrm{d}\Omega}\right\}
\end{array}\right. \\
\qquad\qquad\qquad\qquad\text{认识路线：演绎过程，本质} \rightarrow \text{现象，信息扩充} \\
\left.\begin{array}{l}
\text{逆问题}\{E_n,\psi_n\} \\
\left\{\text{相移}\delta_{lJ}(E),\text{截面}\dfrac{\mathrm{d}\sigma_{\beta\alpha}}{\mathrm{d}\Omega}\right\}
\end{array}\right\} \rightarrow \hat{H}
\end{array}\right.
$$

认识路线：归纳过程，现象 → 本质，信息压缩

## 11.3 按照系统的量子运动方程的可积性和运动的规则性的分类

我们将从物理学而不是从纯数学的角度讨论量子力学运动方程的可积性问题, 把量子运动方程的可积性与量子规则运动和量子无规运动紧密联系起来讨论。

量子运动可分为规则运动和无规运动两大类, 其间是两类运动并存的中间形态的广大区域, 量子无规运动的极端就是量子混沌。对这些不同的物理运动状态的问题的数学表述，就是量子运动方程的可积性, 不可积性和部分可积性问题。

量子规则运动的特点是系统具有完备的好量子数，波函数和能级是这些好量子数确定的规则函数。这种量子规则运动的动力学根源是系统的 Hamilton 量具有动力学对称性，因而可以用群论方法求解，故它们自然是可积的。量子规则运动一般有两种情况，线性可积系统和非线性可积系统。线性系统一定是可积的，大多数非线性系统则是不可积的。但也有一些非线性系统，或者可以通过非线性变换线性化, 或者具有动力学对称性和相应的守恒的量子数，因此仍然是可积的描述某种规则的量子运动。

量子无规运动的特点是除能量、角动量、宇称等基本守恒量外，系统不再具有其他好的量子数；波函数和能级由于众多复杂状态的混杂而表现极不规则，在极端情况下表现出如 GOE(高斯正交系综) 的统计特征。量子无规运动的动力学根源在于粒子间的相互作用严重地破坏了系统的动力学对称性及其相应的守恒量子数, 其数学表现则是运动方程的不可积性。

量子规则运动和量子无规运动的并存与交织是一个普遍的现象, 构成量子现象的中间形态的广大区域。

量子规则运动与系统的动力学对称性相联系，而量子无规运动与系统的动力学对称性的严重丧失相联系，而动力对称性又可以用群论或代数的语言加以描述。因此，无论量子规则运动，还是量子无规运动，只要系统的代数结构知道了，就可以用代数动力学的方法加以研究 (第 14 章)。

上述讨论可概括为下表：

III
- 可积问题：完备守恒量 (量子数) 集，规则运动
- 中间形态
  - 部分可积 (部分守恒量保持)，规则运动
  - 部分不可积 (部分守恒量丧失)，无规运动，二者并存
- 不可积问题：守恒量 (量子数) 的丧失，无规运动, 极端无规运动 (混沌)

## 11.4 按照系统的非线性度的分类

量子力学问题按照系统的非线性度的分类的意义在于，运动方程的非线性度的不同导致本质上不同的量子运动形态。非线性一般表示多粒子系统中粒子之间的相互作用、耦合及反馈效应, 导致丰富多彩的结构和运动形态的形成、分化和演变。线性系统是可积的，与规则运动相联系；大多数非线性系统是不可积的, 与无规运动相联系。纷繁多变、相互关联的物理世界在本质上是非线性的。

这一节的分类应与 11.3 节分类联系起来研究，小结如下：

Ⅳ
- 线性系统：可积性，规则运动
- 可线性化的非线性系统: 通过非线性变换可化成线性系统, 规则运动
- 非线性可积系统：规则运动
- 非线性不可积系统：无规运动, 极端无规运动：混沌

## 11.5 按照系统的 Hamilton 量的时间依赖性的分类

量子力学系统的全部动力学信息都包含在系统的 Hamilton 量之中。Hamilton 量包含系统三方面的信息: ① 系统的动力学变量即广义坐标和广义动量及其代数结构；② 系统中各个粒子 (或各个动力学自由度) 的惯性参数；③ 势场和粒子之间的相互作用及其参数。如果系统是孤立的, 与外界环境没有相互作用, 则 Hamilton 量中的参数和势场都不显含时间, 这样的系统叫做自治系统。系统内部相互作用决定系统自身的运动变化，不受外界的干预，是独立的、自治的。反之, 如果系统不是孤立的, 与外界环境有相互作用, 环境的运动变化可以使系统的 Hamilton 量中的参数和势场随时间发生变化, 进而影响、干预系统的运动。这种受环境影响因而不完全独立的系统叫做非自治系统，环境通过随时间变化的参数或势场, 对系统实行控制和干预。非自治量子系统与 11.6 节第 14 章和将要讨论的人造量子系统密切相关。在人造量子系统中, 人们通过随时间变化的人工势场或边界条件对系统进行控制和影响, 体现了人类改造自然的能力的增强。这一分类概况为下表：

Ⅴ
- 自治系统：$\hat{H}$ 与 $t$ 无关, 系统自治地运动, 不受外界干预
- 非自治系统：$\hat{H}=\hat{H}(t)$，体现系统受环境的影响或人工的控制

## 11.6 按照系统的来源的分类

随着科学技术的飞速进步, 人类对微观系统的研究和利用, 已经从大自然恩赐的微观粒子系统到人类自己创造的微观粒子系统。在原子核物理学中, 天然的原子核同位素只有近 300 多种, 但目前人类可以通过加速器产生 6000~7000 种不稳定的原子核。在基本粒子物理学中, 数千种非宇宙线基本粒子, 都是人们在实验室中

制造出来的。凝聚态物理学和介观物理学的情况也是如此, BEC 和许多介观电路、介观器件都是人造的。因此, 目前人类已从研究和利用天然量子系统的时代, 进入到了研究和利用人造量子系统的时代, 而且即将进入创造、控制和利用微观粒子系统，即量子工程的时代。在这一形势下, 量子力学的研究领域也应做相应的扩展与调整，非自治量子力学和代数动力学正是因为这种需要而发展起来的。上述讨论概括如下：

Ⅵ { 自然系统的量子力学：研究自然界存在的量子系统
　　人造系统的量子力学：研究人造的量子系统

## 11.7　按照系统与环境的关系的分类

严格说来, 任何系统都不能脱离开环境，即使是理想孤立的系统, 也是在真空背景中运动。真空背景也是环境, 是一种最普遍的宇宙环境。就狭义相对论物理学的时空背景而言, 真空是稳定的、均匀的、各向同性的, 它对一切事物的影响是以真空背景的几何的 Poincare 群变换不变性的形式出现的, 即以尺钟效应及其运动学效应的形式出现的。但在微观量子尺度，真空背景却是涨落的，真空涨落是量子波的涨落。它有两种属性: ① 涨落波的量子运动学属性, 量子涨落波的最小作用量是 $\hbar/2$, 量子涨落波的能量–动量与波长–频率之间服从 de Broglie 关系; ② 涨落波的量子随机属性, 近似的白噪声属性和严格的 Planck 尺度属性 (真空量子涨落波的平均时 - 空尺度或能量–动量尺度为 Planck 尺度)。真空背景的微观的、近似的白噪声量子涨落效应已纳入了量子物理的运动学即量子化条件之中 (见第 1、2、8、12 和 15 等章中的有关论述)。而真空背景的微观量子涨落的、严格的 Planck 尺度属性却表现为引力效应，是当前人们正在探索，并不十分清楚的问题 (见王顺金：《物理学前沿：问题与探讨》，科学出版社，2013 和 S. J. Wang. ar Xiv: 1212. 5862[gr–qc], 24. Dec. 2012 )。

这里讲的环境是狭义的, 即真空背景以外的物质和物理场所构成的环境。按照系统与狭义环境的关系, 分为封闭系统与开放系统, 它们的特点列于下表：

Ⅶ { 封闭系统与环境隔离，无能量、粒子交换；N、E、$\vec{p}(\hat{J})$守恒
　　开放系统与环境相互作用，在动力学方面, 有能量、粒子交换；N、E、$\vec{p}(\hat{J})$ 不守恒；在统计力学方面，有熵和信息的交换。

## 11.8　按照量子运动模式的分类

量子世界由系统和真空环境组成，量子世界的基本要素包括微观粒子、相互作用和真空背景。量子世界的基本属性包括对称、关联和系统–环境耦合。

上述观点导致对三种基本的量子运动模式的界定。现阐述如下：

(1) 量子世界 = 系统＋广义环境，系统＝微观粒子＋相互作用，

广义环境＝真空背景＋普通物质、物理场背景。

(2) 量子世界的基本要素：微观粒子、相互作用、真空背景。

(3) 量子世界的基本属性：对称、关联、系统–环境耦合。

它们的来源和后果是对称来自真空和环境的对称性以及内部相互作用的对称性，导致量子对称运动模式; 关联来自相互作用导致的多体关联，导致量子关联运动模式; 环境与系统的相互作用与耦合，导致系统与环境之间的量子耦合运动模式。

(4) 量子世界的运动模式分为对称运动模式、关联运动模式、系统–环境耦合运动模式。

(5) 量子运动模式的动力学分为描述对称运动模式的代数动力学、描述关联运动模式的关联动力学、描述系统–环境耦合运动模式耦合动力学。

上述论述构成本书第二部分的基本观点和基本内容。

本章内容涉及本书第 12~15 章的内容。

# 第二篇

# 量子运动模式动力学

# 第 12 章　量子世界与量子运动模式

## 12.1　量子世界的基本要素

在研究了各种各样的量子多体系统之后，我们需要从更广阔的视野、更深入的层次去审视和分析量子世界的基本特征。让我们从基本问题入手。

物理学研究什么？物理学研究物质世界运动和变化的基本规律。

量子物理学研究什么？量子物理学研究微观世界运动和变化的基本规律。

微观世界是量子世界, 因此，量子物理学研究量子世界运动和变化的基本规律。

### 1. 量子世界

过去研究微观粒子系统, 通常把真空背景看成量子世界之外的东西。但是, 现在人们认识到，没有真空背景, 就不能理解粒子的惯性和惯性运动, 也不能理解守恒定律的起源, 更不能理解粒子的起源。正如没有相互作用就不能理解粒子运动的变化一样。为了全面、深刻理解量子世界，必须扩充量子世界的概念，使它包括两个方面的内涵: 系统和背景, 而系统又包括微观粒子及其相互作用。

因此，我们对量子世界的再认识的结论是: 量子世界 = 量子系统 + 真空背景，　量子系统 = 微观粒子 + 相互作用。

### 2. 量子世界的基本要素

那么，什么是量子世界的基本要素呢? 量子世界既然是存在于真空背景中的微观粒子及其相互作用。其基本要素自然包括微观粒子、相互作用和真空背景。微观粒子是量子世界的主体, 它们在真空背景影响下、在相互作用中运动。

它们如何运动呢? 它们的运动形式或运动模式是什么?

### 3. 真空背景和相互作用决定量子系统的运动模式

量子系统的运动模式由真空背景和相互作用决定。

1) 真空背景如何影响微观粒子的运动呢? 它通过三个方面施加影响：

(1) 真空背景的微观量子涨落和真空背景的宏观对称性；

(2) 微观量子涨落的影响已包含在量子论的量子化条件之中；

(3) 真空背景的宏观对称性使粒子运动具有外部对称性、普适的守恒定律和外部对称运动模式。

2) 相互作用如何影响微观粒子的运动呢？它也通过两个方面施加影响：

(1) 相互作用产生多粒子之间的动力学关联，使量子系统具有关联运动模式；

(2) 相互作用的对称性使量子系统具有内部对称性和内部对称运动模式。

## 12.2　量子系统的基本属性和运动模式

前节已指出量子系统的运动模式由真空背景和相互作用决定，具体说来

(1) 真空背景的对称性导致系统普适的守恒定律和外部对称运动模式；

(2) 真空与粒子的相互作用与耦合, 导致环境对系统的塑造作用和系统对环境的反作用，并导致耦合运动模式；

(3) 相互作用的内部对称性导致动力学守恒定律和内部对称运动模式；

(4) 相互作用导致量子系统的多体关联和关联运动模式。

因此，形形色色的量子系统有三种基本属性：对称性、多体关联、系统–背景耦合。

总之, 三种属性来自以下三个方面。

1) 来自真空背景的属性

真空背景 (时空) 的彭加莱对称性，导致动量–能量、角动量守恒定律

2) 来自量子多体系统内部的属性：

(1) 低能运动模式的层展 (emegent) 对称性 (来自量子能标阶梯性导致的低能模式的 Hilbert 子空间的近似对称性结构) 和相互作用的动力学对称性，导致内部守恒定律和内部量子数;

(2) 相互作用导致的多体关联, 导致各种等级的关联运动：独立粒子运动、集体运动、粒子对运动、集团运动和无规运动等。

3) 来自系统–背景 (环境) 耦合的属性 (有待深入研究)

环境对系统的塑造作用和系统对环境的反作用：量子背景 (环境) 选择了量子系统的存在形式 (量子数), 从可能的存在形式中选择几率最大的存在形式。

以概率论标志的统计力学的最可几存在原理，等价于以守恒定律和决定论标志的动力学的最小作用量原理。

总之，关联、对称和系统–背景耦合是量子系统的三种属性，决定量子系统的运动模式、结构和性质:

(1) 背景和相互作用的对称性导致量子对称运动模式，成为代数动力学的物理基础；

(2) 多体相互作用导致的量子多体关联运动模式，成为关联动力学的物理基础；

(3) 环境和系统相互作用导致的量子耦合运动模式，成为系统–环境耦合动力学的物理基础。

## 12.3 量子运动模式的动力学

前面 12.1 节和 12.2 节的讨论要点可总结如下。

(1) 量子世界 = 系统 + 环境 (背景)。

(2) 量子系统的基本属性：

对称: 外部对称性来自真空环境, 内部对称性来自相互作用;

关联: 多体关联来自相互作用;

系统–环境耦合: 环境对系统的塑造作用和系统对环境的反作用导致环境与系统的耦合。

(3) 量子系统的运动分为对称运动模式、关联运动模式、系统–环境耦合运动模式。

(4) 相应的量子运动模式动力学为描述关联运动模式的关联动力学 ( 见第 13 章)，描述对称运动模式的代数动力学 ( 见第 14 章)，描述系统–环境耦合运动模式的耦合动力学 (见第 15 章)。

后面 3 章将详细介绍上述三个动力学的内容, 下面介绍它们的要点。

(1) 关联动力学应原子核多体理论的需要而建立，它描述大系统内子系统的耦合动力学行为, 其基本思路是把多体系统分解为不同等级的相对独立的多体关联子系统, 每个多体关联子系统都是彼此非线性耦合起来的开放系统, 把各个子系统耦合起来的基本物理量是平均场和多体关联。

就原子核多体系统而言，多体关联的基本类型有以下几种。

长程相互作用产生平均场整体关联，体现多粒子环境对每个粒子的整体平均影响，导致独立粒子运动，如原子、原子核的壳层结构、固体的能带结构；

平均场的变化产生系统的整体相干运动，即集体运动，如分子及原子核的转动和振动。

平均场以外的剩余相互作用产生多体关联：

多体关联的长程、低频部分表现为集团运动，对二体关联，如固体和原子核中的粒子对运动导致的超导、超流现象; 对四体关联，如原子核中的 $\alpha$ 集团导致的重原子核 $\alpha$ 衰变现象；多体关联的短程、高频部分表现为涨落运动，出现耗散、输运和混沌。相互作用的时空非线性使频率–波矢非线性增长，导致运动时空结构碎裂。粗略地说，运动的时空混沌就是运动的时空结构碎裂。

(2) 代数动力学的基本概念和物理基础。

真空背景和相互作用的对称性使量子运动具有对称模式, 需用对称代数描述;

量子定态和非定态对称运动模式的代数描述，即量子数和量子跃迁的代数描述;

量子对称运动模式的定态及其量子数用卡当算子的本征矢和本征值描述;

量子对称运动模式的非定态量子跃迁 (激发、退激发) 用升、降算子描述。

代数动力学的物理基础是量子运动能标的等级阶梯性 (巨大的能标差距)，使系统低能运动模式的卡当算子、升算子和降算子形成一个近似闭合代数 (运动学代数)，使系统的等效 Hamilton 量具有动力学代数结构 (这是量子动力学对称性的层展性，emergence of quantum dynamical symmetry)，进而使系统的运动学代数生成元随时间演化成为代数动力学。因此，量子运动能标的等级阶梯性是内部动力学对称性成为闭合代数并形成代数动力学的物理基础。

代数动力学是通常的 Heisenbeng 量子力学的推广, 是核结构研究中的代数–群论方法和动力学对称性理论的发展。它把量子力学从通常的 “Heisenbeng 代数动力学” 形式 (其运动学变量是广义坐标和动量，服从 Heisenbeng 代数，其时间演化算子 ——Hamilton 量是 Heisenbeng 代数生成元的函数，其 Heisenbeng 代数生成元的动力学服从 Heisenbeng 方程)，推广为一般的“李代数动力学”形式 (其运动学变量是李代数生成元，服从一般李代数，其时间演化算子 ——Hamilton 量是李代数生成元的函数，其李代数生成元的动力学服从 Heisenbeng 方程)。

(3) 系统–环境耦合动力学[1]。

系统和环境相互作用，在系统和环境保持其各自的相对独立的个性的条件下，形成一种特殊的耦合形式，环境对系统的塑造作用和系统对环境的反作用；对量子世界而言，量子背景选择量子系统的存在形式 (量子数), 从可能的存在形式中选择概率最大的存在形式。量子背景与量子系统之间的相互作用，达到平衡时，以量子涨落和纠缠式的形式表现其耦合，并在对涨落平均后保持各自的个性。

系统–环境耦合动力学不同于多体关联动力学之处在于前者的系统和环境的多体组元之间的相互作用导致的耦合较弱，因而能保持各自的相对独立的个性。而后者的多体组元之间的耦合较强，多体关联运动的相对独立性较弱。

三种属性和三种动力学可表示为下面的三角关系

关联

对称

关联动力学描述

代数动力学描述

关联运动模式的时间演化

系统及其
相互作用

对称运动模式的时间演化

多体关联来自
相互作用

外部对称性来自背景
内部对称性来自相互作用

环境

系统和环境相互作用导致系统–环境保持各自个性的耦合

系统–环境耦合动力学描述

系统–环境二者的耦合运动模式的时间演化

本章内容涉及本书第 13 章 ~ 第 15 章的内容。

# 参 考 文 献

[1] 王顺金. “第七届彭桓武理论物理论坛”报告：系统–环境耦合动力学——从非马尔科夫动力学谈起，2011.

# 第 13 章　量子关联运动模式和关联动力学

本章从原子核物理学的实验事实和理论经验出发，阐述了原子核及量子多体关联动力学的基本物理思想与理论方法，介绍了关联动力学的三种形式: 关联密度矩阵动力学、关联 Green 函数动力学和 QCD 的约束关联动力学。本章侧重于物理思想深入浅出的陈述和理论结果的诠释, 还介绍了量子关联动力学在原子核物理学和凝聚态物理学中的主要应用。

## 13.1　引　　言

当代科学技术的迅速发展，揭示了越来越多的与强耦合有关的量子多体现象 (如凝聚态物理中的高温超导，原子核结构、反应和衰变问题, 粒子物理学中的强子结构与夸克禁闭等问题)，这要求在量子多体问题和量子场论中发展处理强耦合的非微扰理论。多体系统中的强耦合必然导致各种等级的多体关联，使得非微扰理论常常又是多体关联理论。因此，从弱耦合的微扰论向强耦合的非微扰论与多体关联理论的发展，是当前量子多体理论和量子场论中一个十分重要的发展方向。而原子核多体关联动力学或量子多体关联动力学[1-14,53-57,73]，则是在这个方向上的一个尝试。

量子多体关联动力学的目的在于从描述量子关联运动模式的动力学入手, 发展强耦合量子多体理论和量子场论中处理强相互作用的非微扰理论。认识到强耦合必然导致多体关联和关联运动模式，因而应从关联动力学入手去发展处理强耦合的非微扰理论。又认识到量子多体系统的关联是从低阶向高阶逐渐表现出来的，故在理论描述中，相应地把多体关联划分为不同的等级，分别以不同阶的多体关联函数去描述。这样，就把描述多体系统整体行为的理论，转变成描述其中各个等级的多体关联子结构的动力学理论。自然界中显示出的量子系统的各级多体关联的相对独立性和相互耦合，就表现为各阶多体关联函数运动方程的相对独立性和非线性耦合。各阶多体关联子结构的客观相对独立性以及多体关联随阶数增加其重要性迅速减小，使得可以对关联动力学运动方程按关联等级作截断近似。而低阶关联截断近似 (平均场近似与二体关联近似) 在物理上特别重要，在数学上易于求解，因而成为当今最重要的多体理论途径。总之，从量子多体关联运动入手发展强耦合的非微扰理论，把多体系统的运动看成由不同等级的多体关联运动子结构组成的有机整体。既强调了各阶多体关联运动子结构的相对独立性，又重视它们之间的非

线性耦合，这是量子多体关联动力学理论的基本思想。

量子多体关联动力学的基本方法：①用集团展开方法[1,12] 或生成泛函方[13,54]，从多体密度矩阵 (多体 Green 函数) 中分离出关联密度矩阵 (关联 Green 函数)；②把密度矩阵 (Green 函数) 的运动方程转变成关联密度短阵 (关联 Green 函数) 的运动方程，将量子关联动力学用于原子核多体问题，得到原子核多体关联动力学，在低阶近似下研究原子核的各种性质; ③对规范场，运用代数动力学方法[15] 处理规范约束条件，把规范条件转变成守恒定律问题与初值问题[14]。

量子多体关联动力学作为一种有效的非微扰理论途径，在原子核物理学研究中已经得到广泛的应用，并在重离子核反应的微观输运理论[2-7,15,16]、相对论性重离子碰撞中 π 介子产生的双温现象和 π 介子发射的偏向性[19-23]、热原子核巨共振衰变宽度的温度无关性[24]、原子核的小振幅运动和双声子巨共振[25-28,108-123] 以及重子核反应中的质量扩散[29-31] 等方面获得一系列成功的、引人瞩目的结果，解决了核物理学中一些长期存在的重要问题，使得原子核多体关联动力学理论方法在国际核物理学界上受到越来越多的重视。20 世纪 90 年代以来, 量子多体关联动力被成功用于凝聚态物理中哈伯德模型和安德森模型的非微扰求解, 得到一些新的物理结果[93-105]。与此同时, 量子多体关联动力的基本思想和理论方法还被团簇物理学家用于建立激光驱动的团簇系统中的激子和声子的关联动力学方程[106,107]。

在本章中，我们将介绍量子多体关联动力学的基本思想和方法，原子核多体关联理论的近期发展，其主要结果和应用。本章安排如：13.2 节介绍原子核和量子多体关联动力学的产生背景和发展过程; 13.3 节介绍量子多体理论中适合处理强耦合的关联密度矩阵动力学与关联 Green 函数动力学; 在 13.4 节中将介绍量子场的关联 Green 函数动力学和规范场的约束关联动力学; 13.5 节简要介绍原子核多体关联动力学在原子核物理学和凝聚态物理学中的主要应用; 13.6 节我们对原子核多体关联动力学的一些基本特征、最基本的思想与方法、它与其他多体理论的关系做一个简要的描述。

## 13.2 原子核的基本运动形态与多体关联运动模式

半个多世纪的实验和理论研究声明，原子核结构和运动表现出四种形态或层次：①由自洽平均场支配的独立粒子运动；②由于自洽平均场变化而产生的集体运动；③由于剩余相互作用或结团力导致的集团运动；④由剩余相互作用的复杂成分引起的上述三种运动形态以外的无规运动或涨落。上述四种运动形态只具有相对独立性，在实际的原子核中，它们相互耦合，构成相互作用的非线性动力学系统。前三种运动已有相应的动力学理论，而无规运动则只有统计理论，还缺乏动力学理

论的描述。

对于上述四种运动形态的深入研究表明，相互作用导致的各种程度的多体关联是产生上述运动形式的原因：众多核子相互作用的叠加和平均产生的自洽平均场体现了整体关联并决定了多体系统中所有粒子的独立粒子运动，剩余相互作用引起平均场及其整体关联的变化造成集体运动，剩余相互作用的结团分量导致多粒子关联引起集团运动，剩余相互作用中的短程高频分量引起的平均场和多粒子关联结构的涨落导致无规运动。因此，自洽平均场及其变化、多体关联 (特别是二体关联和四体关联) 和无规涨落是理解原子核结构和运动模式的几个基本要素，这三者是原子核多体关联运动模式的三种形态。

平均场作为多体关联的一个极端，是规则的、整体的、稳定的、大尺度的关联。原子核多体系统中的粒子，通过平均场相互联络、通信，任何位子都在平均场支配下按一定的量子轨道运动，而且其运动状态的变化都会通过反馈引起平均场的变化进而影响其他粒子的运动，这正是有机整体性的表现。多体系统中的粒子既产生平均场又受制于平均场，这是一种自洽反馈式的非线性过程，保证了系统的有机整体性。

无规涨落运动作为多体关联的另一极端，反映了不规则、不稳定、小尺度的关联。而二体、三体、四体等关联运动则介于两者之间。

因此，相互作用导致的多体关联是基本的概念。正确描述和处理多体关联运动是理解原子核结构和原子核反应的关键之一。

原子核理论的发展是随着人们对多体关联重要性认识的深化和对多体关联的正确处理而向前发展的。下面，我们分别从原子核结构与核反应两个方面来说明这个问题。

### 13.2.1　原子核结构与核反应中的关联运动模式

1. 核结构中的关联运动模式

人们在对有限核的结构的研究中，通过模型理论从不同侧面认识到多体关联的重要性。由表 13-1 可以看出，自洽平均场整体关联、二体和四体关联是理解原子核结构的几个基本要素，而这三者是原子核多体关联的三种形式。

人们对原子核平均性质 —— 核物质的研究，同样也是随着对多体关联重要性的认识的深化而发展的。由通常微扰理论到 Bethe-Goldstone-Brueckner (BGB) 理论再到 BGB-Faddeev (BGBF) 理论[33,34]，生动地体现了人们对多体关联的认识和处理不断深化。

通常的微扰论由于强作用和排斥硬心的存在而失效，这使得人们认识到正确处理二体关联的重要性。继后发展的 BGB 理论，从裸作用 $v$ 到计算 $G$–矩阵，充分考虑了梯形图二体关联。而 BGBF 理论则进一步从裸作用 $v$，过渡到 $G$–矩阵和

$T$ 矩阵，在梯形图范围内, 将二体关联 (在 $G$- 矩阵中) 和三体关联 (在 $T$ 矩阵中) 同时考虑了进去。

**表 13-1 原子核结构模型理论与对多体关联的认识**

| 运动模式 | 多体关联类型 | 模型理论名称 |
|---|---|---|
| 独立粒子运动 | 来自自洽平均场整体关联 | Fermi 气体模型、壳层模型和<br>广义壳层模型 |
| 集体运动 (两种观点) | 来自平均场整体关联的变化<br>(宏观几何观点) | 集体转动、振动的 Bohr- 莫特逊<br>宏观几何模型 (BMM) |
| | 来自核子对相互作用 ($S=0,2$)<br>(微观代数观点) | 相互作用玻色子模型和<br>费米子动力学对称性模型等<br>微观代数模型 (IBM 和 FDSM) |
| 集团运动 | 二体关联 | $S=0$ 的对：先辈数理论与<br>BCS-Bogoliubov 理论<br>$S=0,2$ 的对：IBM 与 FDSM 模型 |
| | 四体关联 | $\alpha$ 集团模型 |

同时，对多体关联的研究也推动了自洽平均场理论的发展。在原始的 Hartee-Fock (HF) 理论的基础上，通过对关联的研究，产生了包括对关联的 HF-Bogoliubov (HFB) 理论。同时考虑二体、三体关联的 HF-Brueckner-Faddeev (HFBF) 理论及其等价物 —— 密度有关的等效相互作用理论，不仅能说明原子核的结合能与密度分布 ($B$,$\rho$)，而且能再现某些低能核谱[35]。

上述分析表明，正确认识和处理多体关联，不仅对于了解原子核的总体平均性质 ($B$,$\rho$) 十分重要，而且对于理解原子核低能核谱也必不可少，更是描述集团运动和集体运动的关键。

2. 核反应中的关联运动形式

如表 13-2 所示，在核反应理论中，由光学模型到直接反应模型再到前平衡与复合核模型的发展以及在微观理论上由时间有关的 Hartree-Fock(TDHF) 到扩展的 TDHF(ETDHF) 及其简化 —— 耗散的非绝热动力学 (DDD)，再到重离子输运理论及多步过程理论的发展，同样也是随着对多体关联认识的深化和正确处理而向前发展的。对多体关联认识得越清楚，处理得越正确，理论中包含的多体关联成分越多，理论的功能就越强，所能解释的实验现象就越多。

总之，人们通过对原子核结构和原子核反应两个侧面的探讨，已经清楚地认识到处理好多体关联的重要性。而表 13-2 中提到的各种理论，则可视为对多体关联在不同程度上加以概括和处理的具体的多体关联理论，是一些分散而没有统一起来的多体关联理论。

**表 13-2 原子核反应理论与对多体关联的认识**

| 理论类型 | 核反应理论名称 | 对多体关联的认识和处理 |
|---|---|---|
| 模型理论 | 光学模型 | 光学势包含平均场整体关联 |
| | 直接反应理论 | 核子对转移和 $\alpha$ 转移,<br>与二体和四体关联密切相关 |
| | 前平衡核反应理论和复合核反应理论 | 趋向平衡的统计热力学过程和<br>复合核形成, 与高阶多体关联的<br>复杂性导致的无规运动有关 |
| 微观理论 | 时间有关的 Hartree-Fock(TDHF) | 通过$G$矩阵和等效核力 (Skyrme 力),<br>多体关联 (主要是二体、三体关联)<br>进入 TDHF 方程的整体平均场 |
| | 扩展的 TDHF(ETDHH)<br>及其近似理论 DDD 和 BUU | 碰撞项目中明显包含二体关联 |
| | 多步过程理论及输运理论 | 无规矩阵假定、统计热力学过程,<br>与高阶多体关联的复杂性相关 |

### 13.2.2 原子核多体关联理论的发展过程

对多体关联重要性的认识必然要求人们把视线放在更基本的微观理论上，探索建立微观多体关联理论的可能性。这就使得原子核多体理论研究出现了一个新的发展趋势，即从一般微扰论向多体关联动力学理论发展的新趋势。下面从三个方面来说明这一趋势。

1. 图形微扰论及其发展

如前所述，由于通常微扰论对强相互作用和硬心势的失效，在 20 世纪 50~60 年代发展起来了 BGBF 理论。BGBF 理论用包含了二体、三体关联的等效相互作用代替裸相互作用进行物理量的计算，但它还不是完全的多体关联动力学理论，而是从微扰论到多体关联动力学理论的过渡形式或中间形态的理论。

在 20 世纪六七十年代，由 Coester-Kummel 等[36-38] 发展起来的定态集团理论则是多体关联动力学的一种形式。在这一理论中，选定基态 $\varPhi_0$, 将态矢 $\varPsi$ 作集团展开 $\varPsi=\exp(\sum\limits_n \hat{s}_n)\varPhi_0$，由定态 Schroedinger 方程 $\hat{H}\varPsi=E\varPsi$，给出 $\hat{s}_n$ 所满足的方程，以此来描述集团运动。

到 20 世纪 70~80 年代，Monkhorst-Hoodhoy-Negele 等[39-41] 将 Coester-Kummel 理论发展为时间有关的集团展开理论。他们同样将态矢量按集团运动模式展开，从时间有关的 Schroedinger 方程 $\mathrm{i}\dfrac{\partial}{\partial \mathrm{t}}\varPsi=\hat{H}\varPsi$，给出 $\hat{s}_n$ 所满足的运动方程，对原子核系统的集团运动的时间演化予以描述。

上述这些集团展开理论能较清楚地划分出不同的集团运动分量，对原子核系统不同层次的集团关联运动作出描述，这是其优点。但该理论的缺点也是明显的，

主要表现为① $\hat{s}_n$ 涉及与 $\hat{s}_{n-1}$ 和 $\hat{s}_{n-2}$ 耦合的数学复杂性；②它对处理基态和纯粹系综方便，对处理激发态和混合系综不方便；③带有一定的主观随意性，$\hat{s}_n$ 的求解与基态 $\Phi_0$ 的选取有关。

2. Green 函数理论

采用 Green 函数微扰级数加上 Dyson 级数求和方程，限制某些类型的关联图形的求和，可以得到切断的、非微扰的包含关联的 Green 函数，成为一种可以处理多体关联的途径。这是通过部分求和规则包含关联改进平均场质量算子的 Green 函数途径。

Martin-Schwinger 等[46] 在 1959 年，建立起 $n$- 体 Green 函数 $G_n$ 随时间演化的方程，但没有将多体关联部分 $G_{nc}$ 明显地分离出来。1978 年, Wong-Tang[47,48] 试图克服这一缺点，并重点讨论了二体关联，给出了二体关联 Green 函数的分离公式 $G_{2c} = G_2 - G_{20}$，并得到了二体关联的一级微扰表达式。但他们并未解决二体关联动力学的完整问题，即没有求得 $G_{2c}$ 所满足的运动方程。此后一段时间虽经努力有所发展，但多体关联 Green 函数动力学的一般问题仍未得到解决，即使是 $G_{2c}$ 的运动方程也没有建立起来 (虽然二体关联 Green 函数 $G_{2c}$ 的低阶微扰公式已经存在)。因而，20 世纪 80 年代以前只有部分的或低阶微扰的二体关联 Green 函数理论[42-45]，没有非微扰的完整的多体关联 Green 函数理论。

非相对论多体关联 Green 函数动力学的一般形式[8-12] 是 20 世纪 90 年代建立起来的，这是本章将要介绍的内容之一。

3. 密度矩阵理论

在 20 世纪 50 年代，Bogoliubov-Bom-Green-Kirwood-Yvonne[49] 给出了约化密度矩阵的运动方程组 (BBGKY 系列)，这是密度矩阵理论发展中重要的一步。但 BBGKY 系列的缺点在于多体关联没有明显分离出来，因而不便于作截断近似。

为了克服 BBGKY 体系的缺点，也为了给耗散的非绝热动力学 (DDD) 提供微观多体理论基础，1982 年, Wang-Noerenberg[50,51] 从低阶约化密度矩阵的运动方程出发，引入关联函数 $C_2$ 及 $C_3$，给出了二体关联动力学基本运动方程组。在此基础上，作为二体关联动力学的推广，1985 年, Wang-Cassing[1] 进而建立了任意阶的、密度矩阵形式的原子核和量子多体关联动力学的一般理论，得到一组耦合的、非微扰的各级关联密度矩阵随时间演化的动力学方程组。

## 13.3　量子多体理论中的关联动力学

原子核或量子多体关联动力学[1-12](NMBCD 或 QMBCD) 是在原子核多体理

论的基础之上发展起来的一种理论形式。这一理论形式的特点是通过多体关联函数来描述原子核或量子多体系统的关联运动模式的层次性。它的基本目的在于建立起各级多体关联所满足的、耦合的、非线性的、非微扰的动力学方程组。这一方程组既反映了各级多体关联运动模式的相对独立性，又表现出它们之间存在的非线性耦合。原子核或量子多体关联动力学不同于通常的多体微扰论按相互作用强度的幂次展开，而是按多体关联运动子结构的等级展开。由于多体关联运动子结构随其涉及的粒子数增加, 其重要性迅速减小，这种理论描述能提供一种自然而合理的截断近似方案，并使得每一个截断近似都导致一种非线性的、非微扰的近似理论，描述某一等级的多体关联效应。

原子核多体关联动力学, 可以统一的描述原子核多体系统中的独立粒子运动、集体运动、集团运动以及非平衡过程中的无规运动。它不仅将现今常用的原子核多体理论 (在定态方面有 HF、HF-Brueckner-Faddeev 以及温度有关的HF和RPA等，在非定态方面有 TDHF、ETDHF、时间有关的 $G$- 矩阵理论等), 统一在它的理论框架之内，成为它不同近似下的结果，而且还为重离子运输理论、BUU 方程提供了量子多体理论基础[17,18]。

原子核或量子多体关联力学是在传统的量子多体理论的基础之上发展起来的。Green 函数理论[42-45] 和密度矩阵理论[49] 是量子多体理论的两大途径。这两种理论途径的求解有两种基本方法: 一种是微扰论方法；另一种是运动方程法。前者直接给出多体系统的解的微扰级数展开式，而后者给出解所满足的运动方程。对于密度矩阵形式的多体理论，Prigogine[49] 阐述了 von Neumann 方程中多体密度短阵的微扰论解法，而密度矩阵的 BBGKY 体系则给出解所满足的运动方程。对于 Green 函数理论，Feynman[52] 精心设计了Green 函数的微扰论解法，而 Martin-Schwinger[45] 则给出了多体 Green 函数所满足的运动方程。BBGKY 系列和 Martin-Schwinger 系列的运动方程的缺点是缺乏一个合理而系统的截断方案，因而妨碍了它们的实际应用。为了找到一个合理而自然的截断方案，必须过渡到多体关联动力学。1959 年，Matin-Schwinger 为给他们的体系寻找截断方案而产生了关联 Green 函数动力学的思想[45]。1962 年，Prigogine 为给 BBGKY 系列寻找截断方案而产生了关联密度矩阵动力学的思想[49] 。可惜的是无论是 Martin-Schwinger，还是 Prigogine 都没有建立起多体关联动力学的方程组，他们只是限于讨论二体关联动力学，而且所得的二体关联的运动方程也是不完整的。原子核多体关联动力学则继承了 BBGKY 系列和 Martin-Schwinger 系列的理论成果并克服了他们的局限性，在原子核多体理论研究成果的基础上，建立起量子多体关联动力学的完整体系。

总之, 原子核或量子关联动力学是因原子核多体理论的需要而建立的，它描述大系统内各个子系统之间的耦合动力学行为。其基本思路是把多体系统分解为不

同等级的相对独立的多体关联子系统, 每个多体关联子系统都是彼此非线性耦合起来的开放系统, 把各个子系统耦合起来的基本物理量是平均场和多体关联。

对原子核多体系统而言, 量子多体关联运动模式的基本类型包括：

(1) 长程相互作用产生平均场整体关联运动模式，体现多粒子环境对每个粒子的整体平均影响，导致多体系统中所有粒子的独立粒子运动, 产生出如原子、原子核的壳层结构、固体的能带结构;

(2) 平均场变化导致系统的整体相干运动即集体运动, 如分子、原子核的转动和振动;

(3) 平均场以外的剩余相互作用的长程、低频成分产生多粒子关联运动模式，导致集团运动，如二体关联导致固体和原子核中的粒子对运动和相应的超导、超流现象，四体关联导致原子核中的 $\alpha$- 集团和重原子核的 $\alpha$ 衰变现象;

(4) 剩余相互作用的短程、高频部分导致涨落和无规运动，出现输运、耗散和时空混沌，相互作用的时空非线性使频率–波矢非线性增长导致运动的时空结构碎裂，直观地说运动的时空混沌就是运动的时空结构碎裂。

原子核或量子多体关联动力学分两支，一支是多体关联密度矩阵动力学[1,7]，它是在 BBGKY 系列的基础之上发展起来的，可以看成 Prigogine 思想的发展。另一支是多体关联 Green 函数动力学[8-12]，是在 Martin-Schwinger 系列的基础之上发展起来，可以看成 Martin-Schwinger 思想的发展。下面分别介绍这两个方面的发展。

### 13.3.1 多体关联密度矩阵动力学

密度矩阵形式的多体关联动力学的基本方法是从约化密度矩阵中分离出关联密度矩阵，并把约化密度矩阵所满足的线性的、耦合的方程组转变成关联密度矩阵的非线性的、耦合的动力学方程组。它提供了一种系统的按多体关联等级截断的非微扰的近似方案，其低阶似导致 HF、HF-Brueckner-Faddeev 近似以及相应的时间有关的理论。目前，密度矩阵形式的多体关联动力学已从非相对论推广到相对论，从核物质推广到强子物质，从二体关联动力学的半经典近似和相空间表示推导出了 BUU 方程，在非相对论和相对论性重离子碰撞的输运问题中得到广泛的应用。最近，非相对论二体关联动力学 (也称时间有关的密度矩阵理论，即 TDDM) 也用于描述原子核巨共振和双声子共振及其衰变，低能重离子碰撞中的质量扩散[25-31]。数值结果表明，TDDM 能再现同位旋标量巨四极共振衰变宽度并给出比 TDHF 大数倍的质量涨落宽度。将 TDDM 运用于小振幅振动发现二体关联动力学方程的小振振幅极限能提供一个比二阶 RPA 更一般的理论框架，兰道扩展宽度也能够自然得到。这方面的具体结果将在 13.3.2 小节中介绍。

1. 非相对论情形

非相对论[1] 多体系统的量子运动可以用多体密度矩阵 $\rho_A$ 描述，它的时间演化服从 von Neumann 方程 (本书采用自然单位制 h=1)

$$\mathrm{i}\dot{\rho}_A = [H, \rho_A] \tag{13-1}$$

$$H = \sum_{i=1}^{A} h_0(i) + \sum_{j>i=1}^{A-1} v(ij) \tag{13-2}$$

引进约化密度矩阵之后

$$\rho_n = \frac{1}{(A-n)!} \operatorname*{Tr}_{(n=1,\cdots,A)} \rho_A \tag{13-3}$$

von Neumann 方程转化为约化密度矩阵满足的 BBGKY 方程组系列

$$\mathrm{i}\dot{\rho}_n = \left[\sum_{i=1}^{n} h_0(i) + \sum_{j>i=1}^{n-1} v(ij), \rho_n\right] + \operatorname*{Tr}_{n+1}\left[\sum_{i=1}^{n} v(i, n+1), \rho_{n+1}\right] \quad (n = 1, 2, \cdots, A) \tag{13-4}$$

从 BBGKY 方程组系列过渡到多体关联动力学的关键在于从 $\rho_n$ 中分离出 $n$–体关联密度矩阵 $c_n$。这可以通过下列非线性变换 (集团或关联展开) 来实现

$$\rho_n = AS\sum_{p=1}^{n-1} \rho_{n-p}\rho_p + c_n \qquad (c_1 = \rho_1 = \rho) \tag{13-5a}$$

其中，$c_n$ 是 $n$ 体关联, $A$ 是反对称化运算, $S$ 是对称化运算。以 $\rho_2$ 为例, 有

$$\begin{aligned} \rho_2(12, 1'2') &= AS\rho(11')\rho(22') + C_2(12, 1'2') \\ &= \rho(11')\rho(22') - \rho(12')\rho(21') + C_2(12, 1'2') \end{aligned} \tag{13-5b}$$

将集团展开的式 (13-5a) 代入 $\rho_n$ 的方程，经过一些复杂的运算，可以得到 $c_n(c_1 = \rho_1 = \rho)$ 的运动方程

$$\begin{aligned} \mathrm{i}\dot{c}_n = &\left[\sum_{i=1}^{n} h_0(i) + \sum_{j>i=1}^{n-1} v(ij), c_n\right] + \operatorname*{Tr}_{n+1}\left[\sum_{i=1}^{n} v(i, n+1), c_{n+1}\right] \\ &+ \underset{n}{AS}\sum_{p=1}^{n-1}\left[\sum_{j>i=1}^{n-1} v(ij), \rho_{n-p}\rho_p\right]_L + \sum_{p=1}^{n}\operatorname*{Tr}_{n+1}\left[v(i, n+1), \underset{n+1}{AS}\,\rho_{n-p+1}\rho_p\right]_L \end{aligned} \tag{13-6a}$$

其中，$[\cdots]_L$ 表示连接项，该项中每个函数因子中的变量是重复相连的 (对应于场论中连接的 Feynman 图形)。

方程 (13-6b) 是多体关联密度矩阵动力学的基本方程组。该方程组以多体关联矩阵为基本物理量，描述相互作用产生多体关联以及不同等级的多体关联相互耦

合、随时间演化的物理过程。如果物理系统的多体关联随着等级 (粒子数) 的增加而迅速减弱 (这是核物理和量子多体问题实验经验告诉我们的)，则该方程组提供了一个按多体关联等级截断的自然的近似方案，而且每一种截断都导致一个非微扰的、非线性的方程组，描述一定等级的多体关联运动模式和多体关联效应。

上述关联密度矩阵动力学的基本方程组的特点是：

(1) 从 $\rho_n$ 中分离出连接的不可约的部分，像场论中的不可约连接图形，避免了信息的重复；

(2) 非线性的耦合的运动方程既体现各阶多体关联子结构的相对独立性, 又体现出它们之间的非线性耦合；

(3) 因为多体关联 $C_n$ 随 $n$ 的增加而迅速减小，所以上述方程组本身提供了一个自然而合理的截断方案；

(4) 对每一种截断近似，都导致一组有限的封闭的、一定阶的多体关联的非线性、非微扰的耦合的运动方程。

上述关联密度矩阵动力学方程组中, 最重要的是二体关联密度矩阵动力学, 它由假定三体以上的关联为零而得到，它们是

$$
\begin{aligned}
&\mathrm{i}\hbar\dot{\rho} = [h, \rho] + \mathrm{Tr}[v(12), AS\rho\rho + C_2] \\
&\mathrm{i}\hbar\dot{C}_2 = [h(1) + h(2), C_2] + [v(12), AS\rho\rho + C_2] + \mathrm{Tr}\left[v(13) + v(23), AS(\rho\rho\rho + \rho C_2)\right]_L
\end{aligned}
\tag{13-6b}
$$

这是耦合的、非线性的、非微扰的、包含 $\rho$ 和 $C_2$ 的封闭的运动方程组，是超越平均场 (TDHF) 近似的运动方程组，已获得广泛的应用 (见 13.5 节)。

关联密度矩阵动力学方程组的最低阶近似 ($c_n = 0$，$n \geqslant 2$) 导致平均场理论 (TDHF 与 HF)，二阶截断近似 ($c_n$= 0,$n \geqslant 3$) 导致的二体关联动力学，把 Bethe-Goldstone 方程、ETDHF 、时间有关的 $G$–矩阵理论 (TDGM) 作为近似情况包含于其中。三阶截断近似下的三体关联动力学的研究还很不充分，只知道它的定态极限包含 Faddeev 方程。有兴趣的读者可参看文献 [1] 和本书 5.2.4 小节。

随着计算机技术的发展，对低阶多体关联动力学方程的数值求解展现出光明的前景。目前，在截断的 Hilbert 空间对二体关联动力学的数值计算表明，它能给出比 TDHF 好得多的结果。先进的计算机技术的发展，可使多体关联动力学中最重要的二体和三体关联动力学方程，有更加精确而完善的数值实现。

2. 相对论情形

在相对论性重离子碰撞中，相对论效应变得十分重要，必须运用相对论性输运方程来描述原子核反应过程[4,6]。当原子核碰撞的能量达到每核子 1-2GeV 时，有一半的核子–核子碰撞截面变为非弹性的，核子的 $\Delta$ 粒子激发和介子自由度在反

应过程中起着十分重要的作用。然而，在这个能区，碰撞过程中产生的密度和压强还没有达到把强子分解为夸克和胶子的程度。因而还没有必要求助于量子色动力学 (QCD)，而量子强子动力学 (QHD) 反而是更为恰当的理论描述工具。也就是说，需要发展强子物质的输运理论。

20 世纪 80 年代末，描述高能重离子碰撞的相对论性输运理论尚处于发展的初期阶段，而强子物质的输运理论则更处于襁褓之中。这里将简要介绍为了解决相对论性强子物质的输运方程问题，如何将密度矩阵形式的多体关联动力学从非相对论情形推广到相对论情形，又从核物质推广到强子物质。

从 Walecka 的量子强子动力学的 Lagrange 密度出发[6]

$$L(x) = L_0(x) + L_{\text{int}}(x) \tag{13-7}$$

其中，$L_0$ 是重子场 $N(x)$ 和 $\Delta(x)$ 以及介子场 $\pi(x)$，$\sigma(x)$ 和 $\omega_\mu(x)$ 等的自由 Lagrange 密度

$$\begin{aligned}L_0(x) =& \bar{N}(x)(\mathrm{i}\gamma^\mu\partial_\mu - M_N)N(x) + \bar{\Delta}(x)(\mathrm{i}\gamma^\mu\partial_\mu - M_\Delta)\Delta(x)\\&+\frac{1}{2}[\partial_\mu\pi(x)\cdot\partial^\mu\pi(x) - m_\pi^2\pi(x)\cdot\pi(x)]\\&+\frac{1}{2}[\partial_\mu\sigma(x)\partial^\mu\sigma(x) - m_\sigma^2\sigma^2(x)]\\&-\frac{1}{4}F^\omega{}_{\mu\nu}(x)F_\omega^{\mu\nu}(x) + \frac{1}{2}m^2{}_\omega\omega_\mu(x)\cdot\omega^\mu(x)\end{aligned} \tag{13-8}$$

$L_{\text{int}}(x)$ 是由最小耦合法则给出的重子场与介子场之间的相互作用 Lagrange 密度，即

$$\begin{aligned}L_{\text{int}}(x) =& -\mathrm{i}g_{\pi NN}\bar{N}(x)\gamma_5 TN(x)\cdot\pi(x) + g_{\sigma NN}\bar{N}(x)N(x)\sigma(x)\\&-g_{\omega NN}\bar{N}(x)\gamma^\mu N(x)\omega_\mu(x)\\&+g_{\pi N\Delta}[\bar{\Delta}_\mu(x)TN(x)\cdot\partial^\mu\pi(x) + \bar{N}(x)T^+\Delta^\mu(x)\cdot\partial_\mu\pi(x)]\\&-\mathrm{i}g_{\pi\Delta\Delta}\bar{\Delta}_\mu(x)\gamma^5 T\Delta^\mu(x)\cdot\pi(x) + g_{\sigma\Delta\Delta}\bar{\Delta}_\mu(x)\Delta^\mu(x)\sigma(x)\\&-g_{\omega\Delta\Delta}\bar{\Delta}_\mu(x)\gamma^\nu\Delta^\mu(x)\omega_\nu(x)\end{aligned} \tag{13-9}$$

其中，$F^\omega{}_{\mu\nu} = \partial_\mu\omega_\nu - \partial_\nu\omega_\mu$，$T$ 是同位旋算子，核子场 $N(x)$ 是同位旋空间和 Minkowski 空间中的旋量，$\Delta(x)$ 场采用 Rarita–Schwinger 的描述方式，$\pi(x)$ 场是同位旋矢量和 Minkowski 空间的赝标量，$\sigma(x)$ 在 Minkowski 空间和同位旋空间均是标量，$\omega_\mu(x)$ 是同位旋空间的标量和 Minkowski 空间的矢量。

上述 Lagrange 所对应的运动方程的严格求解是不可能的，我们必须寻求合理的近似。注意到，式 (13-7)～ 式 (13-9) 中的介子场的主要作用是传递重子之间的强相互作用。特别是 $\sigma$ 和 $\omega_\mu$ 场，主要充当传递强相互作用的虚位子。对于 π 场，情

况比较复杂，它除了充当虚粒子传递强相互作用外，还代表真实的物理位子，可以被探测器接收到。这与电磁场十分相似，其横向分量代表真实的物理光子，而纵向分量只充当传递 Coulomb 相互作用的虚粒子。

我们对 Walecka 模型的第一步简化是在运动方程中消去传递强相互作用的所有虚介子，只保留重子场和实的 $\pi$ 介子场。在量子电动力学中，由于光子的静质量为零，横向光子和纵向光子的区分以及消去纵向光子的过程是严格的。在这里，由于 $\pi$ 介子的有限静质量，对实 $\pi$ 介子和虚 $\pi$ 介子的划分只能是近似的，但这一近似是非常有效的。

运用 Green 函数方法求解虚介子的运动方程，就可以消去虚介子。在重子场的运动方程中出现重子场之间的非线性相互作用项，而且这些相互作用项在时空上是非定域的。

运动方程在时间上的非定域性，对于运用密度矩阵理论框架表述输运方程是不方便的。幸好，介子传递过程中的推迟效应所导致的运动方程在时间上的非定域性，在我们所考虑的能区内并不十分重要。这使得我们可以采用瞬时介子交换近似去重新建立时间上的定域性，从而使运动方程可以纳入密度矩阵理论框架之内。瞬时介子交换近似表现在介子场的 Green 函数的时间定域近似上，即

$$G(x-x') \approx G(r-r')\delta(t-t') \tag{13-10}$$

引进重子的密度短阵 $\rho$，$\pi$ 介子的密度矩阵 $\rho_\pi$ 和重子 $-\pi$ 相互作用的顶角函数 $\varGamma$，其定义分别为

$$\rho_n(1,2,\cdots,n;1',2',\cdots,n')=\langle\psi^+(1')\psi^+(2')\cdots\psi^+(n')\psi(n)\cdots\psi(2)\psi(1)\rangle \tag{13-11}$$

$$\rho_\pi(x,x') = \langle\pi(x')\cdot\pi(x)\rangle \tag{13-12}$$

$$\varGamma(x,y,x') = \langle\psi^+(x')\pi(y)\psi(x)\rangle \tag{13-13}$$

对于纯重子场，可以建立完整的多体关联密度矩阵动力学体系。考虑 $\pi$ 介子场以后，我们只限于建立二体关联动力学的方程组，它们是

$$\mathrm{i}\frac{\partial\rho}{\partial t} = [E+U_{\mathrm{HF}},\rho] + \underset{(2)}{\mathrm{Tr}}[v(12),C_2] + [U_\pi,\Gamma] \tag{13-14}$$

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\frac{\partial C_2}{\partial t} =& [E(1)+E(2)+v(1,2),C_2] + [v(1,2),\underset{(12)}{AS}\,\rho(1)\rho(2)]\\ &+\underset{(3)}{\mathrm{Tr}}[v(1,3)+v(2,3),\underset{(123)}{AS}\,(\rho(1)\rho(2)\rho(3)+\rho(1)C_2(23))]\end{aligned} \tag{13-15}$$

$$\mathrm{i}\frac{\partial\rho_\pi}{\partial t} = [E_\pi,\rho_\pi] + \frac{1}{2}\left[\frac{1}{E_\pi}u,\varGamma\right] \tag{13-16}$$

$$
\begin{aligned}
\mathrm{i}\frac{\partial\Gamma(x,y,x')}{\partial t}=&[h,\Gamma(x,y,x')]+U_{\pi}(x)\rho_{\pi}(y;x)\rho(x;x')\\
&-\rho(x;x')[\rho_{\pi}(x';y)U_{\pi}(x')]+E_{\pi}(y)\Gamma(x,y,x')\\
&+\frac{1}{2E_{\pi}(y)}\left[\underset{(xy)(yx')}{AS}\rho(x;y)\rho(y;x')+C_2(x,y;y,x')\right]
\end{aligned}\tag{13-17}
$$

其中，$E$，$E_{\pi}$ 分别是重子和 π 介子的相对论动能算符，$h=E+U_{\mathrm{HF}}$，$U_{\mathrm{HF}}$ 是自洽场，$U_{\pi}$ 和 $u$ 是与 π 介子–重子相互作用有关的算符 (见文献 [6])。

从上述方程组可以推导出强子物质的相对论性输运方程。为此，需要采取 3 个步骤:①用时间有关的 $G-$ 矩阵方法解求式 (13-15), 将 $C_2$ 的解代入式 (13-14)；②取式 (13-17) 的 2 级近似解并代入式 (13-14) 和式 (13-16)；③对得到的式 (13-14) 和式 (13-16) 进行 Wigner 变换，在计算平均场贡献和碰撞项时取半经典近似。这样，就把核子的非相对论性的 BUU 方程推广到相对论并包括强子物质 (包括核子,Δ 粒子和 π 介子)，得到重子场和 π 介子场耦合的输运方程 [6], 它们是

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial f_b(xp)}{\partial t}+\frac{\Pi^i}{E_b^*(p)}\nabla_i^x f_b(xp)-\frac{\Pi^{\mu}}{E_b^*(p)}\nabla_i^x U_{\mu}(x)\nabla_p^i f_b(xp)\\
&+\frac{M_b^*}{E_b^*(p)}\nabla_i^x U_s(x)\nabla_p^i f_b(xp)=I_{bb}^b(xp)+I_{b\pi}^b(xp)
\end{aligned}\tag{13-18}
$$

$$
\frac{\partial f_{\pi}(xk)}{\partial t}+\frac{k\cdot\nabla^x}{E_{\pi}(k)}f_{\pi}(xk)=I_{b\pi}^{\pi}(xk)\tag{13-19}
$$

其中, $b=p,n,\Delta$, $E_b^*=(\Pi^i\Pi_i+{M^*}_b{}^2)^{1/2}$, $M_b^*=M_b+U_s$, $\Pi_{\mu}=p_{\mu}-U_{\mu}$, $E_{\pi}(k)=(k^2+m_{\pi})^{1/2}$, $U_{\mu}$ 和 $U_s$ 是 $U_{\mathrm{HF}}$ 平均场的 4–矢分量和标量分量, $I_{bb}^b$ 和 $I_{bn}^b$ 分别是重子–重子碰撞项和重子–π 吸收及发射项，$I_{b\pi}^{\pi}$ 是重子的 π 吸收和发射对 π 介子输运过程的影响，其具体表达式列于文献 [6，7] 中。上述输运方程在相对论性重离子碰撞问题中得到相当成功的应用 [19-23]。

### 13.3.2　多体关联 Green 函数动力学

建立 Green 函数形式的多体关联动力学[8-12] 的基本方法是从多体 Green 函数中分离出关联 Green 函数，并把 Martin-Schwinger 系列转变成多体关联 Green 函数的非线性的、耦合的动力学方程组。多体关联 Green 函数满足的这一动力学方程组供了一种系统的、按多体关联等级 (粒子数) 截断的、非微扰的近似方案，其低阶截断近似导致平均场近似下的 Dyson 方程和 TDHF，Bethe-Salpeter 方程和环形图对应的反映极化效应的运动方程以及把梯形图和环形图、短程关联和长程关联统一在一起的完整的二体关联 Green 函数动力学方程组。多体关联 green 函数理论是多体关联密度矩阵动力学的多时推广，为建立相对论性量子场的多体关联动力学创造了条件。把多体关联 Green 函数动力学在虚时间轴上延拓，可以建立

起多体关联温度 Green 函数动力学[11]，为平衡态统计物理学提供一个非线性的、非微扰的 Green 函数方法。

1. 多体关联 Green 函数的运动方程

考虑相互作用的费米子系统，其场算符为 $\psi(x,t)$，$\psi^+(x,t)$，其相互作用 Hamilton 量为

$$H=\int\psi^+(x,t)\psi(x,t)\mathrm{d}x+\frac{1}{2}\iint\psi^+(x,t)\psi^+(x',t)v(x,x')\psi(x',t)\psi(x,t)\mathrm{d}x\mathrm{d}x' \tag{13-20}$$

运用 Heisenberg 运动方程和 $H$ 的表达式及场算符的对易关系，可以求得场算符 $\psi(x,t)$ 和 $\psi^+(x,t)$ 所满足的运动方程。引进 $n$- 体 Green 函数

$$\mathrm{i}^nG^{(n)}(1,2,\cdots,n;1',2',\cdots,n')=\langle T[\psi(1)\psi(2)\cdots\psi(n)\psi^+(n')\cdots\psi^+(2')\psi^+(1')]\rangle \tag{13-21}$$

其中 $T$ 为编时算子，系综平均包括统计力学权重平均和量子力学状态平均，其定义为

$$\langle\cdots\rangle=\frac{\mathrm{Tr}[\cdots\rho(T)]}{\mathrm{Tr}\rho(T)} \tag{13-22}$$

$\rho(T)$ 是描述多体系统初始状态的统计算符。由 Green 函数的定义 (13-21) 与场算符的运动方程，可得到 $G^{(n)}$ 满足的运动方程，即 Martin-Schwinger 系列

$$\begin{aligned}&\left[\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t_1}-t(1)\right]G^{(n)}(1,\cdots,n;1',\cdots,n')\\&=\sum_{j=1}^{n}\delta^{(4)}(1,j')(-)^{j-1}G^{(n-1)}(2,\cdots,n;1',\cdots,(j'-1),\cdots,(j'+1),\cdots,n')\\&\quad-\mathrm{i}\int\mathrm{d}^4(n+1)V(1,n+1)G^{(n+1)}(1,\cdots,(n+1);1',\cdots,(n+1)^+)\end{aligned} \tag{13-23}$$

其中,

$$V(i,j)=v(r_i-r_j)\delta(t_i-t_j) \tag{13-24}$$

$$t(1)=t(x_i)=-\frac{1}{2m}\nabla_1^2 \tag{13-25}$$

Green 函数 $G^{(n)}$ 的运动方程组 (13-23) 具有与密度矩阵 $\rho_n$ 的运动方程组 (13-4) 类似的缺点，即它们本身不能提供一个合理的截断的近似方案，因而限制了他们的实际应用。为了使方程组 (13-23) 能合理截断，从而可以实际求解，需要过渡到多体关联 Green 函数动力学。推广式 (13-5)，引进表示集团展开的非线性变换以实现多体关联 Green 函数 $G_c^{(n)}$ 的分离, 即

$$G^{(n)}(1,\cdots,n;1',\cdots,n')=G_c^{(n)}(1,\cdots,n;1',\cdots,n')+\underset{\{1',\cdots,n'\}}{A}\ \underset{(2,\cdots,n;2',\cdots,n')}{S}$$

$$\sum_{k=1}^{n-1} G_c^{(k)}(1,\cdots,k;1',\cdots,k')G^{(n-k)}(k+1,\cdots n;(k+1)',\cdots,n') \tag{13-26}$$

其中，$A$，$S$ 是反对称化和对称化算符，但在被操作的变量中应当包含时间坐标[6,12]。将式 (13-26) 代入方程组 (13-23)，经过一些复杂的运算，可得多体关联 Green 函数的运动方程组 ($G_1 = G$)

$$\begin{aligned}\left[\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t_1} - t(1)\right] G(1,1') = &\delta^{(4)}(1,1') - \mathrm{i}\int \mathrm{d}2V(1,2)[G_c^{(2)}(1,2;1,'2^+)\\ &+G(1;1')G(2;2^+) - G(1;2)G(2;1')]\end{aligned} \tag{13-27}$$

$$\begin{aligned}\left[\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t_j} - t(j)\right] G_c^{(n)} = &-\mathrm{i} \underset{(n+1)'=(n+1)}{\mathrm{Tr}} V(j,n+1) \underset{(n+1)}{AS}\\ &\times\left[\sum\sum_{k\geqslant l\geqslant m=0}\sum G^{(k)}G^{(l)}G^{(m)}\delta_{k+l+m,n+1}\right]_L \quad (n\geqslant 2)\end{aligned} \tag{13-28}$$

与多体关联密度矩阵的动力学方程组 (13-6) 类似，多体关联 Green 函数动力学方程组 (13-27) 和方程组 (13-28), 以关联 Green 函数为基本物理量，描述相互作用产生多体关联以及不同等级的多体关联相互耦合、随时间演化的物理过程。它提供了一个按多体关联等级 (粒子数) 截断的合理的近似方案，而且每一种截断都导致一组封闭的、非微扰、非线性的方程组，描述一定等级的关联运动模式和关联效应。

多体关联 Green 函数动力学方程组可以纳入时间闭路积分的形式，有兴趣的读者可参考文献 [8]。

2. 等时极限 —— 回到多体关联密度矩阵动力学

多体关联 Green 函数动力学是多体关联密度短阵动力学的多时推广。反之，多体关联密度矩阵动力学是多体关联 Green 函数动力学的等时极限。为了建立 Green 函数与密度矩阵之间的联系，引进正规等时极限 (NETL) 的概念，其定义为

$$\mathrm{NETL}: 在t_1' > t_2' > \cdots > t_n' > t_n > \cdots > t_1时序下取等时极限 \tag{13-29}$$

显然，密度矩阵是相应的 Green 函数的正规等时极限，即

$$\begin{aligned}\rho_n(1,\cdots,n;1',\cdots,n') &= \langle\psi^+(r_1't),\cdots\psi^+(r_n't)\psi(r_n,t)\cdots\psi(r_1,t)\rangle\\ &= (-\mathrm{i})^n G^{(n)}(1,\cdots,n;1',\cdots,n')_{\mathrm{NETL}}\end{aligned} \tag{13-30}$$

相应地，对于多体关联，有

$$c_n(1,\cdots,n;1',\cdots,n') = (-\mathrm{i})^n G_c^{(n)}(1,\cdots,n;1',\cdots,n')_{\mathrm{NETL}} \tag{13-31}$$

进一步可以证明[9,11,12]，式 (13-31) 对任意时序的等时极限 (AETL) 也成立，即

$$c_n(1,\cdots,n;1',\cdots,n';t) = [(-1)^n G_c^{(n)}(1,\cdots,n,1',\cdots,n')]_{\mathrm{AETL}}(n \geqslant 2) \tag{13-32}$$

对于 $G_c^{(n)}$ 的运动方程 (13-27) 和方程 (13-28) 取正规等时极限，经过复杂运算，可得 $c_n$ 的运动方程组,

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\rho(1;1';t) = [t(1)-t(1')]\rho + \mathop{\mathrm{Tr}}_{(2)}[v(1,2)-v(1,'2')][\mathop{AS}_{(1,2;1,'2')}\rho\rho + c_2] \tag{13-33}$$

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}c_n = &\left\{\sum_{j=1}^{n}[t(j)-t(j')] + \sum_{i>j=1}^{n-1}[v(j,i)-v(j',i')]\right\}c_n \\ &+ \left\{\sum_{i>j=1}^{n-1}[v(j,i)-v(j',i')]\mathop{AS}_{(1,\cdots,n;1',\cdots,n')}\sum_{k=1}^{n-1}\rho_k\rho_{n-k}\right\}_L \\ &+ \mathop{\mathrm{Tr}}_{(n+1)}\left\{\sum_{j=1}^{n}[v(j,n+1)-v(j',n+1)]\right. \\ &\left.\left(c_{n+1} + \mathop{AS}_{(1,\cdots,n+1;1',\cdots,(n+1)')}\sum_{k=1}^{n}\rho_{n-k+1}\rho_k\right)\right\}_L\end{aligned} \tag{13-34}$$

这正是多体关联密度矩阵的运动方程组[12]。因而证明了多体关联 Green 函数动力学在正规等时极限下导致多体关联密度矩阵动力学。进一步可以证明多体关联 Green 函数动力学在任意时序的等时极限下，都导致同样的多体关联密度矩阵动力学。这一性质有着更深刻的根源，多体关联 Green 函数的运动方程与时序无关。

3. 低阶截断近似 —— 通常 Green 函数理论中的非微扰结果

多体关联 Green 函数动力学的优点之一在于它的非微扰性质以及它的截断近似的合理性。在低阶截断近似下，多体关联 Green 函数理论给出通常 Green 函数理论的全部非微扰结果[42]。不仅如此，多体关联 Green 函数动力学超越通常的 Green 函数非微扰理论之处在于它以系统的、解析的形式，把传统的 Green 函数非微扰理论的分散的、不系统的、靠图形求和规则得到的结果统一了起来，将全部多体关联效应按等级概括在相应的方程组中。

1) 平均场近似导致 Dyson 方程和 TDHF 方程

最低阶近似是略去所有二体以上的多体关联, 即假定

$$G_c^{(n)} = 0 \quad (n \geqslant 2) \tag{13-35}$$

由式 (13-27) 得到 $G(1;1')$ 的运动方程

$$\left[\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial \mathrm{t}_1}-t(1)\right]G(1;1')=\delta^{(4)}(1;1')-\mathrm{i}\int \mathrm{d}2V(1,2)[G(1;1')G(2;2^+)-G(1;2)G(2;1') \tag{13-36}$$

引进自由粒子的 Green 函数 $G_0(1;1')$

$$\left[\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial \mathrm{t}_1}-t(1)\right]G_0(1;1')=\delta^{(4)}(1;1') \tag{13-37}$$

式 (13-36) 可写为

$$G(1;1')=G_0(1;1')+\int \mathrm{d}2\mathrm{d}3G_0(1;3)\Sigma(3;2)G(2;1') \tag{13-38}$$

$$\Sigma(3,2)=-\mathrm{i}\{\delta^{(4)}(3,2)\int \mathrm{d}\bar{2}V(3,\bar{2})G(\bar{2};\bar{2}^+)-V(3,2)G(3;2^+)\} \tag{13-39}$$

这正是平均场近似下单位子 Green 函数和自能所满足的 Dyson 方程[42]。

在平均场近似下，单粒子 Green 函数可以写成对角表象形式

$$\begin{aligned}\mathrm{i}G(1;1')=&\theta(t_1-t_1')\sum_\alpha \psi_\alpha(r_1,t_1)\psi_\alpha^*(r_1',t_1')(1-n_\alpha)\\&-\theta(t_1'-t_1)\sum_\alpha \psi_\alpha(r_1,t_1)\psi_\alpha^*(r_1',t_1')n_\alpha\end{aligned} \tag{13-40}$$

其中,$\psi_\alpha(x,t)$ 是一组正交完备的单粒子态。$n_\alpha\leqslant 1$ 是 $\psi_\alpha$ 态的填充数, 与 $t$ 无关，由初始条件决定。把式 (13-40) 代入式 (13-36) 可得 $\psi_\alpha(x,t)$ 所满足的 TDHF 方程

$$\mathrm{i}\frac{\partial\psi_\alpha(r,t)}{\partial t}=h(r,t)\psi_\alpha(r,t) \tag{13-41}$$

$$h(r,t)=t(r)+U_{\mathrm{HF}}(r,t) \tag{13-42}$$

当 $n_\alpha=0,1$ 时，$U_{\mathrm{HF}}$ 正是通常的 TDHF 自洽场[10,11]。

2) 二体关联动力学: Bethe-Salpeter 方程和环形图对应的方程

比平均场近似进一步的近似是二体关联近似，即假定三体以上的多体关联都为零，

$$G_c^{(n)}=0\quad(n\geqslant 3) \tag{13-43}$$

从式 (13-27) 和式 (13-28) 得到二体关联动力学方程组

$$\begin{aligned}\left[\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t_1}-t(1)\right]G(1;1')=&\delta^{(4)}(1,1')-\mathrm{i}\int \mathrm{d}2V(1,2)[G(1;1')G(2;2^+)-G(1;2)G(2;1')]\\&-\mathrm{i}\int \mathrm{d}2V(1,2)G_c^{(2)}(1,2;1',2^+)\end{aligned} \tag{13-44}$$

$$\left[\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t_1}-t(1)\right]G_c^{(2)}(1,2;1',2^+)$$

$$
\begin{aligned}
=&-\mathrm{i}\int \mathrm{d}3V(1,3)[-G^{(2)}(1,3;1',2')G(2;3) \qquad (13\text{-}45\mathrm{a})\\
&+G_c^{(2)}(1,2;1',2')G(3;3^+)-G_c^{(2)}(2,3;2',1')G(1;3)\\
&+G_c^{(2)}(2,3;2',3^+)G(1;1')-G_c^{(2)}(2,3;1',3^+)G(1;2') \qquad (13\text{-}45\mathrm{b})\\
&+G_c^{(2)}(1,2;3,1')G(3;2')-G_c^{(2)}(1,2;3,2')G(3;1')]
\end{aligned}
$$

方程组 (13-44) 和方程组 (13-45) 包含了二体关联的全部图形，即梯形图和环形图及其交织的无穷序列。

不难证明，式 (13-44), 式 (13-45a) 和式 (13-45b) 中第一排, 在单粒子 Green 函数的平均场近似下，导致 Bethe-Salpeter 方程。实际上，引进平均场

$$
U(1)G(1;1')=-\mathrm{i}\int \mathrm{d}2V(1,2)[1-P_{12}]G(2;2^+)G(1;1') \tag{13-46}
$$

单粒子 Green 函数

$$
G(1;1')=\left[\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t_1}-t(1)-U(1)\right]^{-1}\delta^{(4)}(1,1') \tag{13-47}
$$

以及等效相互作用 $\varGamma$

$$
\varGamma \underset{(2)}{AS}\, GG=VG^{(2)} \tag{13-48}
$$

从式 (13-45a) 和式 (13-45b) 中第一排可得 $\varGamma$ 满足的方程

$$
\varGamma=V+\mathrm{i}VGG\varGamma \tag{13-49}
$$

式 (13-49) 正是等效相互作用满足的 Bethe-Salpeter(B-S) 方程[42]，它包括了梯形图的全部贡献, 它对 Walecka 书中的 B-S 方程的改进在于这里的单粒子 Green 函数 $G$ 不再是自由粒子的，而是多体平均场中的单粒子 Green 函数。

同时，还可以证明式 (13-45b) 中的第二、三项相应于环形图的贡献。为了简明起见，在式 (13-45a) 中取 $G^{(2)}\approx GG$ ，对式 (13-45b) 中的第二、三项，取环形图的直接项。这样式 (13-45) 就变成

$$
\begin{aligned}
&\left[\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t_1}-t(1)-U(1)\right]G_c^{(2)}(1,2;1',2')\\
=&-\mathrm{i}\int \mathrm{d}3V(1,3)[-G(1;1')G(3;2')G(2;3)-G(1;1')G_c^{(2)}(2,3;2',3^+)] \qquad (13\text{-}50)
\end{aligned}
$$

引进编时相关函数 $\varPi$ 或 $D$,

$$
\mathrm{i}\varPi(1,2)=\mathrm{i}D(1,2)=-G_c^{(2)}(1,2;1^+,2^+)+G(1;2)G(2;1) \tag{13-51}
$$

$$
\varPi_0(1,2)=D_0(1,2)=-\mathrm{i}G(1;2)G(2;1) \tag{13-52}
$$

则由式 (13-50) 可得 $\Pi$ 所满足的运动方程

$$\Pi = \Pi_0 + \Pi_0 V \Pi \tag{13-53}$$

或

$$\Pi = \frac{1}{1 - \Pi_0 V} \Pi_0 \tag{13-54}$$

定义极化效应导致的等效相互作用

$$U_r = V + V\Pi V = V \frac{1}{1 - \Pi_0 V} \tag{13-55}$$

则极化效应导致的二体关联为

$$G_c^{(2)} = \mathrm{i}GGVGG + \mathrm{i}GGV\Pi VGG = \mathrm{i}GGU_r GG \tag{13-56}$$

$\Pi_0, \Pi, U_r, G_c^{(2)}$ 对应的 Feynman 图形正是通常的 Green 函数理论中环形图和反映极化效应的图形[10,42]。式 (13-45a) 和式 (13-45b) 中的交换项反映了 Pauli 效应，它们对应的 Feynman 图形也更复杂些。

至此，我们在多体关联 Green 函数动力学方程的低阶截断近似下，得到了通常 Green 函数理论的全部非微扰结果, 它们只不过是二体关联动力学的各种低阶截断近似。

4. 多体关联 Green 函数动力学的二次量子化表象形式

上述场论形式的 Green 函数，与量子场论中的 Green 函数在形式上是一样的。但是, 在固体物理中，人们还用二次量子化表象[93-105] 中的产生和湮灭算子来定义 Green 函数。以 Anderson 模型为例, 其 Hamilton 量为

$$\hat{H} = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k \hat{n}_{k\sigma} + \sum_{\sigma} \varepsilon_{d\sigma} \hat{n}_{d\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{\sigma} \hat{n}_{d\sigma} \hat{n}_{d\bar{\sigma}} + \sum_{k\sigma} V_{kd} (C^{+}{}_{k\sigma} d_\sigma + C_{k\sigma} d_\sigma^{+})$$

$$\hat{n}_{k\sigma} = C_{k\sigma}^{+} C_{k\sigma} \cdots \hat{n}_{d\sigma} = d_\sigma^{+} d_\sigma \tag{13-57}$$

在 Heisenberg 表象，由产生、湮灭算子组成的算子 $\hat{O}(C^+, C, d^+, d)$ 的时间演化由 Heisenberg 方程决定

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial \hat{O}}{\partial t} = [\hat{O}, \hat{H}] \tag{13-58}$$

其解为

$$\hat{O}(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar} \hat{O}(0) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar} \tag{13-59}$$

在 Heisenberg 表象，两个算子 $\hat{A}(t)$ 和 $\hat{B}(t')$ 的 Green 函数定义为

$$\langle\langle \hat{A}(t); \hat{B}(t') \rangle\rangle = -\mathrm{i}\theta(t - t') \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(t')]_{\pm} \rangle \tag{13-60}$$

对 Fermi 型算子 $\hat{A}(t), \hat{B}(t')$，取反对易子 $[,]_+$，对 Bose 型算子，取对易子 $[,]_-$。平均值定义为量子统计力学的平均

$$\langle \hat{O} \rangle = \mathrm{Tr}\hat{\rho}\hat{O} \tag{13-61}$$

$\langle \cdots \rangle$ 表示双重平均, 即统计权重平均和量子力学平均。

由 $\hat{A}(t), \hat{B}(t')$ 的运动方程可以求得它们的 Green 函数的运动方程

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \langle\langle \hat{A}(t), \hat{B}(t') \rangle\rangle = \delta(t-t')\hbar \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(t')]_\pm \rangle + \theta(t-t') \langle [[\hat{A}(t), \hat{H}]_-, \hat{B}(t')]_\pm \rangle \tag{13-62}$$

对时间差 $(t-t')$ 做 Fourier 变换，可得

$$\varpi \langle\langle \hat{A}; \hat{B} \rangle\rangle_\varpi = \langle [\hat{A}, \hat{B}]_\pm \rangle + \langle\langle [[\hat{A}, \hat{H}]_-; \hat{B}] \rangle\rangle_\varpi \tag{13-63}$$

同样可以建立起 $\langle\langle [[\hat{A}, \hat{H}]_-; \hat{B}] \rangle\rangle_\varpi$ 的运动方程，它涉及新的 Green 函数，从而形成各种 Green 函数的耦合的运动方程组。像坐标空间的 Green 函数一样，对高阶 Green 函数也可以作集团展开，分离出关联成分, 得到关联 Green 函数的运动方程组。然后对高阶关联 Green 函数做截断近似，就得到一个有限数目的、封闭的方程组，可以进行求解。

对 Anderson 模型 (13-57), 设 $\hat{A} = d_\sigma$ 和 $\hat{B} = d_\sigma^+$, 则有

$$\begin{aligned}
(\varpi - \varepsilon_{d\sigma}) \langle\langle d_\sigma; d_\sigma^+ \rangle\rangle =& 1 + \sum_k V_{kd} \langle\langle C_{k\sigma}; d_\sigma^+ \rangle\rangle + U \langle\langle \hat{n}_{d\bar{\sigma}} d_\sigma; d_\sigma^+ \rangle\rangle \\
(\varpi - \varepsilon_{k\sigma}) \langle\langle C_{k\sigma}; d_\sigma^+ \rangle\rangle =& V_{kd} \langle\langle d_\sigma; d_\sigma^+ \rangle\rangle \\
\langle\langle \hat{n}_{d\bar{\sigma}} d_\sigma; d_\sigma^+ \rangle\rangle =& n_{d\sigma} + U \langle\langle \hat{n}_{d\bar{\sigma}} d_\sigma; d_\sigma^+ \rangle\rangle + \sum_k V_{kd} \langle\langle \hat{n}_{d\bar{\sigma}} C_{k\sigma}; d_\sigma^+ \rangle\rangle \\
&+ \sum_k V_{kd} (\langle\langle d_{\bar{\sigma}}^+ C_{k\sigma} d_\sigma; d_\sigma^+ \rangle\rangle - \langle\langle C_{k\bar{\sigma}}^+ d_{\bar{\sigma}} d_\sigma; d_\sigma^+ \rangle\rangle)
\end{aligned} \tag{13-64}$$

对右边出现的新的 Green 函数，也可建立其运动方程，然后对各个高阶 Green 函数作集团展开，得到各阶关联 Green 函数的运动方程组。在所希望的关联阶截断它们，就可求解有限的、封闭的方程组。在求得 $G_d(\varpi) = \langle\langle d_\sigma; d_\sigma^+ \rangle\rangle$ 之后，就可以用它计算各种物理量。二次量子化算符形式的关联 Green 函数动力学, 已用于凝聚态物理中强关联电子系统的非微扰求解, 它超越以往的近似, 得到一些新结果。有兴趣的读者可参考相关文献[93-105]。

## 13.4 量子场论中的关联动力学

量子场论中的关联动力学[13,14,53-57,73] 是非相对论性的多时关联 Green 函数动力学在相对论量子场方面的推广。但是，由于量子场是由多种玻色场和费米场组

成的相互作用系统，而且物理的量子场又是包含规范场的物理系统，其中可存在非线性的自相互作用，且具有动力学群结构、规范群结构和相应的对称性质，这使得量子场的关联动力学具有自身的特点和超乎非相对论情形的复杂性。从物理上说，量子场的关联动力学包括非规范场和规范场的关联动力学两方面。规范场的关联动力学必须包括规范约束条件，因而成为约束关联动力学[14]。从方法上说，在表达量子场的关联动力学时，不再采用直观的集团展开方法而使用与之等价的但威力更大的泛函微分技术。下面分别介绍这两方面的内容。

### 13.4.1　非规范场的关联动力学

1. 标量 $\varphi^4$ 模型

具有自相互作用的 $\varphi^4$ 模型[57] 的 Lagrange 密度为

$$L(x)=\frac{1}{2}\partial_\mu\varphi(x)\partial^\mu\varphi(x)-\frac{1}{2}m^2\varphi^2(x)+\frac{\lambda^4}{4!}\varphi^4(x) \tag{13-65}$$

根据关联动力学[13,57] 方法[1,6,8-13]，得到 $n$ 点关联 Green 函数的运动方程

$$\begin{aligned}&(\partial^{x_1}\partial_{x_1}+m^2)G_c^{(n)}(x_1,\cdots,x_n)\\&=-\mathrm{i}\delta(x_1-x_2)+\int\mathrm{d}y\mathrm{d}z\Big\{\Gamma_0(x_1,y,z)\Big[G_c^{(n+2)}(y,z,x_1,\cdots,x_n)\\&\quad+\underset{(x_2,\cdots,x_n)}{S}\sum_{i=0}^{n}\sum_{j=0}^{n-i}G_c^{(i)}(x_1,\cdots,x_i)\\&\quad\times G_c^{(j+1)}(y,x_{i+1},\cdots,x_{i+j})G_c^{(n-i-j+1)}(z,x_{i+j+1},\cdots,x_n)\\&\quad+\underset{(x_2,\cdots,x_n)}{S}\sum_{i=0}^{n}3G_c^{(i+1)}(y,x_1,\cdots,x_i)G_c^{(n-i+1)}(z,x_{i+1},\cdots,x_n)\Big]\Big\}_L\end{aligned} \tag{13-66}$$

其中，下标 $c$ 表示关联，$\{\cdots\}_L$ 表示连接项，$S$ 表示对其括号内的变量进行对称化置换运算[12,13], $\Gamma_0(x,y,z)=\dfrac{\lambda}{3!}\delta(x-y)\delta(y-z)$。

方程 (13-66) 构成无穷系列，在实际应用中通常采用关联截断近似。如果取最低阶截断，则得到平均场近似，即

$$(\partial_{1\mu}\partial^{1\mu}+m^2)G_c^{(2)}(x_1,x_2)=-\mathrm{i}\delta(x_1-x_2)+\int\mathrm{d}y\Pi(x_1,y)G_c^{(2)}(y,x_2) \tag{13-67}$$

其中，

$$\Pi(x_1,y)=\frac{\lambda}{2!}\delta(x_1-y)\left[G_c^{(2)}(y,y)+G_c^{(1)}(y)G_c^{(1)}(y)\right] \tag{13-68}$$

单点 Green 函数满足的运动方程为

$$(\partial_{1\mu}\partial^{1\mu}+m^2)G_c^{(1)}(x_1)=\frac{\lambda}{3!}G_c^{(1)}(x_1)G_c^{(1)}(x_1)G_c^{(1)}(x_1)$$

$$+\frac{\lambda}{2!}G_c^{(2)}(x_1,x_1)G_c^{(1)}(x_1) \tag{13-69}$$

关联截断近似与粒子的多重产生

为了研究关联对粒子多重产生的效应 [58]，我们以 $\varphi^4$ 场为例，给出几个简单的非微扰结果。

按照 Lehmann–Symanzik–Zirnmerman 约化公式 [59], 粒子产生的分布函数为

$$\begin{aligned}E\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}^3p}&=\frac{1}{(2\pi)^3}\int\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\exp[\mathrm{i}p(x_2-x_1)](\partial_{1\mu}\partial^{1\mu}+m^2)(\partial_{2\mu}\partial^{2\mu}+m^2)\langle\mathrm{i}|\varphi(x_2)\varphi(x_1)|\mathrm{i}\rangle\\&=(p^2-m^2)G^{(2)}(p,q=0)\end{aligned} \tag{13-70}$$

式中，

$$G^{(2)}(p,q)=\int\exp[\mathrm{i}(p+\frac{q}{2})x_1]\exp[-\mathrm{i}(p-\frac{q}{2})x_2]G^{(2)}(x_1,x_2)\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2 \tag{13-71}$$

从式 (13-70) 与式 (13-71) 可见，只要能够严格地求出二点 Green 函数，也就给出了粒子产生的分布函数。在求解二点 Green 画数时有不同的方案，这里采用关联截断近似方法。

为了理解最低阶关联截断近似的含义，我们计算 $\varphi$ 场在其平均值 $\langle\varphi(x)\rangle=G(x)$ 附近的平方及立方涨落

$$\langle|[\varphi(x)-G^{(1)}(x)]^2|\rangle=G_c^{(2)}(x,x) \tag{13-72}$$

和

$$\langle|[\varphi(x)-G^{(1)}(x)]^3|\rangle=G_c^{(3)}(x,x,x) \tag{13-73}$$

式 (13-72) 与式 (13-73) 表明关联函数直接与涨落相联系, 因此把 $G_c^{(3)}(x,x,x)$ 作为小量是一种合理的近似。

在研究粒子多重产生时，在式 (13-65) 中引入与介子场耦合的核子流，得到有效 Lagrange 密度

$$L_{\mathrm{eff}}(x)=L(x)+gj(x)\varphi(x) \tag{13-74}$$

在式 (13-67)∼ 式 (13-69) 中补充与外源 $j(x)$ 有关的项后，进行如式 (13-71) 的变换，得到自洽的输运方程组

$$\begin{aligned}&-(k^2-m^2+\mathrm{i}\varepsilon k^0)G(k)-\frac{\lambda}{2}\int\frac{\mathrm{d}q_1}{(2\pi)^4}G(q_1)G(k-q_1,k-q_1)\\&+\frac{\lambda}{3}\iint\frac{\mathrm{d}q_1}{(2\pi)^4}\frac{\mathrm{d}q_2}{(2\pi)^4}G(q_1)G(q_2)G(k-q_1-q_2)=gj(k)\end{aligned} \tag{13-75}$$

和

$$-\left[\left(p+\frac{q}{2}\right)^2-m^2+\mathrm{i}\varepsilon\left(p^0+\frac{q^0}{2}\right)\right]G(p,q)-\frac{\lambda}{2}\int\frac{\mathrm{d}q_1}{(2\pi)^4}G(q_1,q_2)G\left(p-\frac{q_1}{2},q-q_1\right)$$

$$\times \frac{\lambda}{3}\int\int \frac{\mathrm{d}q_1}{(2\pi)^4}\frac{\mathrm{d}q_2}{(2\pi)^4}G(q_1)G(q_2)G\left(p+\frac{q}{2}-q_1-q_2\right)G^*\left(p-\frac{q}{2}\right)$$
$$=gj\left(p+\frac{q}{2}\right)G^*\left(p-\frac{q}{2}\right)-\mathrm{i}(2\pi)^4\delta(q) \tag{13-76}$$

显然式 (13-75) 和式 (13-76) 仍为闭合的非线性方程组，可采用对耦合常数展开的方法求解。假定二点 Green 函数的展开为

$$G(p,q)=G_0(p,q)+g^2G_2(p,q)+g^4G_4(p,q)+\cdots \tag{13-77}$$

单点 Green 函数的展开为

$$G(q)=gG_1(q)+g^3G_3(q)+g^5G_5(q)+\cdots \tag{13-78}$$

式 (13-77) 中初始值取为

$$G_0(p,q)=(2\pi)^2\delta(q^0)\delta^{(-)}(p^2-m_R^2) \tag{13-79}$$

$$G_0(p)=0 \tag{13-80}$$

$$\delta^{(-)}(p^2-m_R^2)=\theta(-p^0)\delta(p^2-m_R^2) \tag{13-81}$$

将式 (13-77)∼ 式 (13-80) 代入式 (13-75) 和式 (13-76)，并考虑到边界条件 [57]，得到多重粒子分布函数到二阶的贡献为

$$g^{-2}E\frac{\mathrm{d}N^{(2)}}{\mathrm{d}^3p}=j(p)j^*(p) \tag{13-82}$$

多重粒子分布函数的四阶贡献为

$$\begin{aligned}g^{-4}E\frac{\mathrm{d}N^{(4)}}{\mathrm{d}p^3}=&18\pi\int\frac{\mathrm{d}q_1}{(2\pi)^4}|v_2(q_1)|^2\delta^{(-)}\left[(p-q_1)^3-m_R^3\right]\\&+6\mathrm{Re}\int\frac{\mathrm{d}q_1}{(2\pi)^4}\frac{v_2(q_1)j^*(p)j(p-q_1)}{(p-q_1)^2-m_R^2+\mathrm{i}\varepsilon(p^0-q^0)}\\&-4\lambda_R\mathrm{Re}\int\frac{\mathrm{d}q_1}{(2\pi)^4}\int\frac{\mathrm{d}q_2}{(2\pi)^4}\left[\frac{j^*(p)j(q_1)}{(q_1^2-m_R^2+\mathrm{i}\varepsilon q_1)}\times\frac{j(q_2)}{(q_2^2-m_R^2+\mathrm{i}\varepsilon q_2^0)}\right.\\&\left.\times\frac{j(p-q_1-q_2)}{(p-q_1-q_2)^2-m_R^2+\mathrm{i}\varepsilon(p^0-q_1^0-q_2^0)}\right]\end{aligned} \tag{13-83}$$

式中，$v_2$，$\lambda_R$ 和 $m_R$ 分别为二阶有效相互作用、重整化耦合常数及重整化质量 [57]。

如此下去，可以计算多重粒子分布函数的高阶贡献。到二阶为止，关联截断近似与 RPA 近似一致。但到四阶时，前者不仅包含了 RPA 和 Hartree 近似 [57,60]，而且还包含超越这些近似的关联效应。从能得到低阶近似结果这个角度看，关联截断近似把 $G_c^{(3)}$ 作为小量是合理的。同样，关联截断近似也可以给出 $\varphi^4$ 模型的集体现象以及介子 - 介子、介子 - 束缚态和束缚态 - 束缚态之间的散射行为 [57]。这说明关联截断近似是求解场方程非微扰解的一个新途径。

2. Yakawa 模型

Yukawa 模型[13] 是描述核子与介子相互作用的最简单的模型，是对非相对论性核子–核子相互作用的相对论性推广，它进一步考虑了核力的介子效应，其 Lagrange 密度为

$$\begin{aligned}L(x) =&\bar{\psi}(x)(\mathrm{i}\gamma_\mu\partial^\mu - M)\psi(x)\\&+\frac{1}{2}[\partial_\mu\varphi(x)\partial^\mu\varphi(x) - m^2\varphi^2(x)] + g\bar{\psi}(x)\psi(x)\varphi(x)\end{aligned} \tag{13-84}$$

其中，$\psi(x)$ 为核子场，$\varphi(x)$ 为介子场。

混合关联 Green 函数满足的动力学方程组[13] 分别为

$$\begin{aligned}&(\partial^{\xi_1}\partial_{\xi_1} + m^2)G_c^{(m,n)}(x_1,\cdots,x_m;x_1',\cdots,x_m'|\xi_1,\cdots,\xi_n)\\=&-\mathrm{i}\delta(\xi_1,\xi_n)\delta_{n,2} + \int \mathrm{d}x_{m+1}\mathrm{d}x_{m+1}'\varGamma^0(x_{m+1},x_{m+1}'|\xi_1)\\&\{G_c^{(m+1,n-1)}(x_1,\cdots,x_{m+1};x_1',\cdots,x_{m+1}'|\xi_2,\cdots,\xi_n)\\&-\underset{(x_1',\cdots,x_m')}{A}\ \underset{(x_1,\cdots,x_m;x_1',\cdots,x_m')}{S}\ \underset{(\xi_2,\cdots,\xi_n)}{S}\sum_{k=1}^{m}\sum_{l=1}^{n}\\&\times G_c^{(k,l-1)}(x_1,\cdots,x_{k-1},\cdots,x_{m+1};x_1',\cdots,x_k'|\xi_2,\cdots,\xi_n)\\&\times G_c^{(m-k+1,n-1)}(x_{k+1},\cdots,x_m,x_k;x_{k+1}',\cdots,x_m',x_{m+1}'|\xi_{l+1},\cdots,\xi_n)\end{aligned} \tag{13-85}$$

和

$$\begin{aligned}&(\mathrm{i}\gamma_\mu\partial_{x_1}^\mu + M)G_c^{(m,n)}(x_1,\cdots,x_m;x_1',\cdots,x_m'|\xi_1,\cdots,\xi_n)\\=&-\mathrm{i}\delta(x_1,x_m')\delta_{m,1}\\&+\int \mathrm{d}x_{m+1}'\mathrm{d}\xi_{n+1}\varGamma^0(x_1,x_{m+1}'|\xi_{n+1})\{G_c^{(m,n-1)}(x_1,\cdots,x_m;x_1',\cdots,x_m'|\xi_1,\cdots,\xi_{n+1})\\&-\underset{(x_1',\cdots,x_m')}{A}\ \underset{(x_2,\cdots,x_m;x_2',\cdots,x_m')}{S}\ \underset{(\xi_1,\cdots,\xi_n)}{S}\sum_{k=1}^{m}\sum_{l=0}^{n}G_c^{(k,l)}(x_1,\cdots,x_k;x_1',\cdots,x_k'|\xi_1,\cdots,\xi_l)\\&\times G_c^{(m-k,n-l+1)}(x_{k+1},\cdots,x_m;x_{k+1}',\cdots,x_m'|\xi_{l+1},\cdots,\xi_{n+1})\end{aligned} \tag{13-86}$$

其中,$\varGamma_0(x,x'|\xi) = -g\delta(\xi - x)\delta(x - x')$。混合关联 Green 函数的定义参见文献 [13]。方程 (13-85) 和方程 (13-86) 构成了 Yukawa 模型的关联 Green 函数运动方程的无穷系列，它描述不同阶关联 Green 函数的时间演化，反映了关联如何由相互作用产生以及不同阶的关联如何耦合起来。

为了与非相对论关联动力学比较，引入自由介子场的二点 Green 函数

$$\mathrm{i}G_b^0(\xi_1 - \xi_2) = (\partial_{\xi_1}^\mu\partial_{\mu\xi_1} + m^2)^{-1}\delta(\xi_1 - \xi_2) \tag{13-87}$$

在式 (13-85) 中取 $n$=1, 利用式 (13-87) 得到 $G_c^{(m,1)}$ 的积分表达式，在方程 (13-86) 中取 $n = 0$，利用 $G_c^{(m,1)}$ 的积分表达式，可以得到纯费米场的关联 Green 函数的

基本动力学方程组

$$
\begin{aligned}
&(\mathrm{i}\gamma_\mu \partial_{x_1}^\mu + M) G_{fc}^{(m)}(x_1, \cdots, x_m; x_1', \cdots, x_m') \\
=& -\mathrm{i}\delta(x_1, x_m')\delta_{m,1} \\
&- \mathrm{i}\left\{ \int \mathrm{d}x_m v(x_1, x_{m+1}) \underset{(m+1)}{A} \underset{(m+1)}{S} \sum_k \sum_l \sum_q \left[\mathrm{i}^{-k} G_{fc}^{(k)}\right] \right. \\
&\left. \left[\mathrm{i}^{-l} G_{fc}^{(l)}\right] \left[\mathrm{i}^{-q} G_{fc}^{(q)}\right] \delta_{k+l+q,m+1} \right\}_L
\end{aligned} \tag{13-88}
$$

式中，$AS$ 为对称化与反对称化运算 [1,8,11−13]。有效相互作用定义为

$$
v(x_1, x_{m+1}) = -\mathrm{i}g^2 G_b^0(x_1 - x_{m+1}) \tag{13-89}
$$

显然，运动方程 (13-88) 与非相对论关联 Green 函数动力学的运动方程 [11] 具有类似的形式。但值得注意的是方程 (13-88) 中的相互作用在时间上是非定域的，这反映了在相对论性场论中，相互作用的传播需要时间。

### 13.4.2 SU($N$) 规范理论的约束关联动力学

量子色动力学 (QCD) 在预言高能物理现象方面的成功使人们相信它是一个有希望的强相互作用理论 [61-63]。然而,QCD 的广泛应用和进一步检验，要求研究大量与强耦合有关的物理现象，而这些现象的理论描述，需要发展 QCD 的非微扰方法。

近年来，人们试图从不同途径发展 QCD 的非微扰方法，其中包括格点规范理论[64]，变分方法[65] 和 Dyson-Schwinger(D-S) 方程[46]。格点规范理论要求大量的数值分析，其广泛应用依赖于计算机技术的发展。变分方法主要应用于 QCD 的能谱问题。D-S 方法依赖于 Feynman 图形展开求和规则，不能很好地处理规范协变性和规范约束条件，对于高阶 Green 函数也很难建立起正确的运动方程。

在极端相对论重离子碰撞中，可能产生夸克–胶子等离子体 (QGP) 的理论预言，使得发展 QCD 的非微扰理论显得更加必要。由于 QGP 的形成、演化和退激包含着禁闭与退禁闭相之间的转变以及强子化和手征对称性的破缺和恢复，这些过程一般不能用微扰方法来描述，基于 QCD 的非微扰理论的输运方程是人们所希望的。由 Elze 等提出的输运理论，虽然考虑了分布函数的规范协变性 [67]，但在实际应用中仍然是限于平均场近似，因而基于非微扰途径的 QGP 的输运方程仍处于探索阶段。由于多体关联动力学在重离子物理等方面 [5-7,16-31,54-90] 的成功应用，促使我们将多体关联动力学的思想推广到规范场理论，建立起 SU($N$) 规范理论的约束关联动力学[14,53-57,73]。

1. SU($N$) 规范理论、时性规范与正则量子化

SU($N$) 规范理论的 Lagrange 密度[68] 取为

$$L(x) = -\bar{\psi}\gamma^{\mu} D_{\mu}\psi - \frac{1}{4}F^{a}_{\mu\nu}F^{a\mu\nu} \tag{13-90}$$

式中所有的重复指标表示求和。规范协变微分定义为

$$D_{\mu} = \partial_{\mu} - \mathrm{i}gT^{a}A^{a}_{\mu} \tag{13-91}$$

其中，$\gamma_u$ 为 $4\times4$ Hermite Dirac 矩阵，$A^{a}_{\mu}$ 为规范势，$T^{\alpha}$ 为 SU($N$) 规范群的 $N\times N$ 生成子，且满足

$$(T^{a})^{+} = T^{a} \tag{13-92}$$

$$\mathrm{Tr}(T^{a}T^{b}) = k\delta^{ab} \tag{13-93}$$

$$[T^{\alpha}, T^{b}] = \mathrm{i}f^{abc}T^{c} \tag{13-94}$$

规范场定义为

$$F^{a}_{\mu\nu} = \partial_{\mu}A^{a}_{\nu} - \partial_{\nu}A^{a}_{\mu} + gf^{abc}A^{b}_{\mu}A^{c}_{\nu} \tag{13-95}$$

其中，$f^{abc}$ 为反对称结构常数。

色电场 $E^{\alpha}_{i}$ 和色磁场 $B^{\alpha}_{i}$ 分别定义为

$$E^{a}_{i} = \mathrm{i}F^{a}_{i0} = -\dot{A}^{a}_{i} + \mathrm{i}\partial_{i}A^{a}_{0} - \mathrm{i}gf^{abc}A^{b}_{0}A^{c}_{i} \tag{13-96}$$

$$B^{a}_{i} = \frac{1}{2}\varepsilon^{ijk}F^{a}_{jk} = \frac{1}{2}\varepsilon^{ijk}(\partial_{j}A^{a}_{k} - \partial_{k}A^{a}_{j} + gf^{abc}A^{b}_{j}A^{c}_{k}) \tag{13-97}$$

$i$，$j$，$k$ 表示空间坐标分量指标。

在正则量子化时，采用时性规范

$$A^{a}_{0} \approx 0 \quad (\approx \text{表示时性规范下相等}) \tag{13-98}$$

这样，$A^{\alpha}_{i}$ 共轭的场可以简化为

$$\pi^{a}_{i} = \frac{\partial L}{\partial \dot{A}^{a}_{i}} = \dot{A}^{a}_{i} \approx -E^{a}_{i} \tag{13-99}$$

Hamilton 函数 $H$ 和 Hamilton 密度 $\mathscr{H}$ 为

$$H = \int \mathrm{d}^{3}x\mathscr{H}(x) \tag{13-100}$$

$$\mathscr{H} = \frac{1}{2}(E^{a}_{i}E^{a}_{i} + B^{a}_{i}B^{a}_{i}) - gI^{a}_{i}A^{a}_{i} + \bar{\psi}\gamma_{i}\partial_{i}\psi \tag{13-101}$$

夸克色流为

$$I_i^a = \mathrm{i}\bar{\psi}\gamma_i T^a \psi \tag{13-102}$$

高斯定律可表示为

$$g^a(x) = \frac{1}{g} D_i^{ac}(x)\pi_i^c(x) + \psi^+(x)T^a\psi(x) \approx 0 \tag{13-103}$$

式中，

$$D_i^{ac} = \delta^{ac}\partial_i + gf^{abc}A_i^b \tag{13-104}$$

在时性规范下，正则量子化条件为

$$[A_i^a(x,t), \pi_j^b(x',t)] = \mathrm{i}\delta_{ij}\delta^{ab}\delta^3(x-x') \tag{13-105}$$

$$\{\psi(x,t), \psi^+(x',t)\} = \delta^3(x-x') \tag{13-106}$$

值得注意的是高斯定律 (13-103) 仅在经典情况下有意义，在量子化后，$g^\alpha(x)$ 成为作用在 Fock 空间内的算符, 必须寻找高斯定律正确的量子场论表达式。此外，在时性规范下，仅消除了部分非物理自由度，还剩下的非物理自由度的消除要通过高斯定律所产生的约束来实现。

2. 规范约束条件

规范理论通常表现出 Lagrange 函数的奇异性，这与存在多余的非物理自由度有关。按照 Dirac 理论，对约束条件可引入 Lagrange 乘子[69-71]。由此得到 SU($N$) 规范理论的总 Hamilton 量为

$$H_T = \int \mathrm{d}^3x[\frac{1}{2}(\pi_i^a\pi_i^a + B_i^a B_i^a) + \bar{\psi}\gamma_i D_i\psi + (\dot{A}_0^a\pi_0^a - \mathrm{i}gA_0^a g^a)] \tag{13-107}$$

式中，$\dot{A}_0^a$ 和 $A_0^a$ 相当于时性规范条件和高斯约束条件的 Lagrange 乘子。高斯函数定义为

$$g^a(x) = \frac{1}{g} D_i^{ac}\pi_i^c(x) + \psi^+(x)T^a\psi(x) \tag{13-108}$$

有了总 Hamilton 量就可以分析约束的性质。由初级约束不随时间变化得

$$\dot{\pi}_0^a(x) = \{\pi_0^a, H_T\} = \mathrm{i}gg^a(x) \approx 0 \tag{13-109}$$

式中，花括号表示泊松括号，高斯函数表示次级约束出现，“≈” 表示 Dirac 弱相等[69-71]。

由次级约束 $g^a(x)$ 不随时间变化得

$$\dot{g}^a(x) = \{g^a(x), H_T\} = -\mathrm{i}gf^{abc}A_0^b(x)g^c(x) \approx 0 \tag{13-110}$$

式 (13-110) 不产生新约束表明，SU($N$) 规范理论仅有两类约束，即初级约束和次级约束，它们满足

$$\{\pi_0^a(x), \pi_0^b(y)\} = \{\pi_0^a(x), g^b(y)\} = 0 \tag{13-111}$$

$$\{g^a(x,t), g^b(y,t)\} = f^{abc} g^c(\vec{x},t)\delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{y}) \tag{13-112}$$

因而，所有的约束都为泊松括号闭合的第一类约束且次级约束 $g^a(x)$ 构成 SU($N$) 剩余规范对称群 (其代数为式 (13-112)) 的生成元。

由于约束函数 $\pi_0^\alpha$，$g^\alpha(x)$ 与规范对称群的生成子相联系 [72]，方程 (13-109) 与方程 (13-110) 表明 $H_T$ 在全空间内与约束函数 $\pi_0^\alpha$,$g^\alpha(x)$ 不对易，因而是规范相关的。而在约束成立的物理子空间内，总 Hamilton 量与约束函数 $\pi_0^\alpha$，$g^\alpha(x)$ 对易，因而是规范不变的。与此同时，约束 $\pi_0^\alpha$ 和 $g^\alpha(x)$ 在全空间内与 $H_T$ 不对易，因而不是守恒量。而在物理子空间内它们与 $H_T$ 对易，因而成为守恒量。

在对 SU($N$) 规范理论进行量子化时，如果选取时性规范，则高斯算符与 Hamilton 量对易，这意味着 Hamilton 量具有 $g^\alpha(x)$ 标志的剩余规范对称性，且 $g^\alpha(x)$ 构成守恒的剩余规范群的生成元。相应地，高斯定律表示为

$$\langle p|g^a(x0)|p\rangle = 0 \tag{13-113}$$

式中 $|p\rangle$ 表示物理态。式 (13-113) 也称为弱高斯定律，它构成的约束消除了剩余的非物理自由度。

3. 高斯定律及 Ward 恒等式的代数表示

为了深入理解 SU($N$) 剩余规范自由度及约束条件，下面从代数动力学 [15] 的观点来讨论高斯定律及 Ward 恒等式 [14,55] 的性质。

在时性规范下 $E_i^\alpha = -\pi_i^\alpha$，对高斯定律式 (13-113) 使用 Stokes 定律，得 [14]

$$\langle p|\oint E_i^a \cdot \mathrm{d}S_i|p\rangle = -g\int\langle p|f^{abc}A_i^b E_i^c|p\rangle \mathrm{d}\Omega + g\int\langle p|\psi^+ T^a\psi|p\rangle \mathrm{d}\Omega \tag{13-114}$$

其物理意义是色荷及其守恒 (电磁场电荷守恒的类比)。而高斯定律的代数含义在于物理态 $|p\rangle$ 是高斯算子表示的 SU($N$) 色李代数 $\{\{g^a(x)\} = \{h_i(x), e_{\pm\alpha}(x)\}\}$ 中所有卡当算子 $\{h_i(x)\}$ 的本征值为零的共同本征态 $h_i(x)|p\rangle = n_i|p\rangle = 0|p\rangle$, 这样的本征态必然导致高斯定律式 (13-113) 成立 $\langle p|g^a(x)|p\rangle = 0$。如果要求色空间的物理态是非简并的单一的，则这样的本征态只能是色单态。因此，从物理直观上说，时性规范消除了色规范场的非物理的纵向分量 (因而只有横向规范色场是物理的)，而高斯定律一方面把虚的纵场与色源联系起来，另一方面通过其平均值为零规定物理空间为色单态。

定义 Lie 括号运算

$$L_{g^a} g^b = [g^a(x), g^b(x)] \tag{13-115}$$

很容易给出 Ward 恒等式的代数表示

$$\langle p | L_{g^{a_1}(x_1 t)} L_{g^{a_2}(x_2 t)} \cdots L_{g^{a_{n-1}}(x_{n-1} t)} g^{a_n}(x_n t) p \rangle = 0 \tag{13-116}$$

其等价的积分表示为

$$\langle p | \exp(-\mathrm{i} \int g^b \varpi^b \mathrm{d}^3 x') g^a(x) \exp(\mathrm{i} \int g^c \varpi^c \mathrm{d}^3 x'') | p \rangle = 0 \tag{13-117}$$

高斯定律及 Ward 恒等式构成了 Green 函数的约束条件，而且它们具有守恒性质。下面将看到，正则形式的 SU($N$) 规范理论的约束关联动力学是关于时间变量的一阶微分方程。这样，作为守恒量的高斯定律及 Ward 恒等式可以转化为关联动力学的初值问题和守恒律问题，从而导致紧凑的 SU($N$) 的约束关联动力学。

由于 $g^\alpha(x)$ 包含 1 点、2 点胶子场和 2 点夸克场，从关联动力学关于守恒律的思想 [1,6,12] 来看, 2 点截断近似保持 2 点算子的守恒性质。这样，即使在平均场近似下，高斯定律也成立。而其他守恒算子如线动量、角动量及费米子数等都是 2 点算子，而能量为 4 点算子，因而保持上述所有物理量守恒的最低阶截断为 4 点〈二体〉截断近似。与之相应的最低阶 Ward 恒等式成为

$$\langle p | [g^a(x, t), g^b(x', t)] p \rangle = 0 \tag{13-118}$$

它构成了对 2 点、3 点及 4 点 Green 函数的约束，由于 Ward 恒等式的守恒性质，它对 Green 函数的约束也可以转化为初值问题与守恒律问题: 若初始时刻满足式 (13-118), 则以后任何时刻也满足此式[14]。

类似地，以上分析可以推广到高阶截断近似。这说明，高斯定律和 Ward 恒等式与关联截断近似是相容的，而且可以转化为初值问题和守恒律问题 [14]。

4. QCD 的二体约束关联动力学

关联 Green 函数的运动方程，可以通过泛函微分技术从作用量原理和关联 Green 函数的生成泛函得到。对细节感兴趣的读者可参考相关文献 [53-57]。下面仅介绍有重要应用价值的二体约束关联动力学[53-57]。

对于 2 点夸克关联密度矩阵，有

$$\begin{aligned}
\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \bar{\psi}(1')\psi(1)\rangle_c =& \langle \bar{\psi}(1')\alpha_s \vec{\nabla}_1^s \psi(1)\rangle_c - \langle \bar{\psi}(1')\alpha_s \overleftarrow{\nabla}_{1'}^s \psi(1)\rangle_c \\
& - \mathrm{i}g[\langle \bar{\psi}(1')(\alpha_s T^b)_1 \psi(1) A_s^b(1)\rangle_c + \langle \bar{\psi}(1')(\alpha_s T^b)_{1'} \psi(1) A_s^b(1')\rangle_c \\
& + \langle \bar{\psi}(1')(\alpha_s T^b)_1 \psi(1)\rangle_c \langle A_s^b(1)\rangle \\
& + \langle \bar{\psi}(1')(\alpha_s T^b)_{1'} \psi(1)\rangle_c \langle A_s^b(1')\rangle]
\end{aligned} \tag{13-119}$$

4 点夸克关联密度矩阵的运动方程为

$$
\begin{aligned}
\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}\langle\bar{\psi}(1')\bar{\psi}(2')\psi(2)\psi(1)\rangle_c =&\langle\bar{\psi}(1')\bar{\psi}(2')((\alpha_s\vec{\nabla}^s)_1+(\alpha_s\vec{\nabla})_2)\psi(2)\psi(1)\rangle_c\\
&-\langle\bar{\psi}(1')\bar{\psi}(2')((\alpha_s\overleftarrow{\nabla})_{1'}+(\alpha_s\overleftarrow{\nabla})_{2'})\psi(2)\psi(1)\rangle_c\\
&-\mathrm{i}g\underset{(12)(1'2')}{AS}\{\langle\bar{\psi}(1')\psi(1)\rangle_c\langle\overrightarrow{\bar{\psi}}(2')\psi(2)A_s^b(1\rangle_c\\
&+\langle\bar{\psi}(1')(\alpha_sT^b)_{1'}\psi(1)\rangle_c\langle\bar{\psi}(2')\psi(2)A_s^b(1')\rangle_c\\
&+\langle\bar{\psi}(1')\bar{\psi}(2')(\alpha_sT^b)_1\psi(2)\psi(1)\rangle_c\langle A_s^b(1)\rangle\\
&+\langle\bar{\psi}(1')\bar{\psi}(2')(\alpha_sT^b)_{1'}\psi(2)\psi(1)\rangle_c\langle A_s(1')\rangle\}
\end{aligned}
\tag{13-120}
$$

1 点至 2 点胶子场运动方程分别为

$$
\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle A_i^a(1)\rangle = i\langle\pi_i^a(1)\rangle \tag{13-121}
$$

$$
\begin{aligned}
\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\pi_i^a(1)\rangle =& i\vec{\nabla}_1^2\langle A_i^a(1)\rangle - i\vec{\nabla}_1^i\vec{\nabla}_1^s\langle A_s^a(1)\rangle\\
&+\mathrm{i}gf^{abc}[D^s(y)(\langle A_i^b(1)A_i^c(y)\rangle_c+\langle A_i^b(1)\rangle\langle A_i^c(y)\rangle)]_{y=1}\\
&+\mathrm{i}g^2f^{abc}f^{cde}P(1_i^e,1_s^d,1_s^b)[\langle A_s^b(1)A_s^d(1)A_i^e(1)\rangle_c\\
&+\langle A_s^b(1)\rangle\langle A_s^d(1)\rangle\langle A_i^e(1)\rangle+\langle A_s^b(1)A_s^d(1)\rangle_c\langle A_i^e(1)\rangle]\\
&-g\langle\bar{\psi}(1)(T^a\gamma_i)\psi(1)\rangle_c
\end{aligned}
\tag{13-122}
$$

$$
\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle A_{i_1}^{a_1}(1)A_{i_2}^{a_2}(2)\rangle_c = \mathrm{i}\underset{[12]\mathrm{in}(12)\mathrm{order}}{S}\langle\pi_{i_1}^{a_1}(1)A_{i_2}^{a_2}(2)\rangle_c \tag{13-123}
$$

$$
\begin{aligned}
\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\pi_{i_1}^{a_1}(1)A_{i_2}^{a_2}(2)\rangle_c =&\mathrm{i}\langle\pi_{i_1}^{a_1}(1)\pi_{i_2}^{a_2}(2)\rangle_c - g\langle\bar{\psi}(1)(T^{a_1}\gamma_{i_1})\psi(1)A_{i_2}^{a_2}(2)\rangle_c\\
&+\mathrm{i}\nabla_1^2\langle A_{i_1}^{a_1}(1)A_{i_2}^{a_2}(2)\rangle_c - \mathrm{i}\nabla_1^{i_1}\nabla_1^s\langle A_s^{a_1}(1)A_{i_2}^{a_2}(2)\rangle_c\\
&+\mathrm{i}gf^{a_1bc}[D^s(y)(\langle A_s^b(1)A_{i_1}^c(y)A_{i_2}^{a_2}(2)\rangle_c+\langle A_s^b(1)A_{i_2}^{a_2}(2)\rangle_c\langle A_{i_1}^c(y)\rangle\\
&+\langle A_s^b(1)\rangle\langle A_{i_2}^{a_2}(2)A_{i_1}^c(y)\rangle_c]_{y=1}\\
&+\mathrm{i}g^2f^{a_1bc}f^{cde}P(1_{i_1}^e,1_s^d,1_s^b)[\langle A_s^b(1)A_s^d(1)A_{i_1}^e(1)A_{i_2}^{a_2}(2)\rangle_c\\
&+\langle A_{i_1}^e(1)A_{i_2}^{a_2}(2)\rangle_c\langle A_s^d(1)\rangle\langle A_s^b(1)\rangle\\
&+\langle A_s^b(1)A_s^d(1)A_{i_2}^{a_2}(2)\rangle_c\langle A_{i_1}^e(1)\rangle\\
&+\langle A_s^b(1)A_s^d(1)\rangle_c\langle A_{i_1}^e(1)A_{i_2}^{a_2}(2)\rangle_c]
\end{aligned}
\tag{13-124}
$$

$$
\begin{aligned}
\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\pi_{i_1}^{a_1}(1)\pi_{i_2}^{a_2}(2)\rangle_c =& \underset{[12]\mathrm{in}(12)\mathrm{order}}{S}\{\mathrm{i}\nabla_1^2\langle A_{i_1}^{a_1}(1)\pi_{i_2}^{a_2}(2)\rangle_c\\
&-\mathrm{i}\nabla_1^{i_1}\nabla_1^s\langle A_s^{a_1}(1)\pi_{i_2}^{a_2}(2)\rangle_c - g\langle\bar{\psi}(T^{a_1}\gamma_{i_1})\psi(1)\pi_{i_2}^{a_2}(2)\rangle_c\\
&+\mathrm{i}gf^{a_1bc}[D^s(y)(\langle A_s^b(1)A_{i_1}^c(y)\pi_{i_2}^{a_2}(2)\rangle_c+\langle A_s^b(1)\pi_{i_2}^{a_2}(2)\rangle\langle A_{i_1}^c(y)\rangle\\
&+\langle A_s^b(1)\rangle\langle A_{i_1}^c(1)\pi_{i_2}^{a_2}(2)\rangle_c)]_{y=1}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&+\mathrm{i}g^2 f^{a_1bc}f^{cde}P(1^c_{i_1},1^d_s,1^b_s)[\langle A^b_s(1)A^d_s(1)A^c_{i_1}(1)\pi^{a_2}_{i_2}(2)\rangle_c\\
&+\langle A^c_{i_1}(1)\rangle\langle A^d_s(1)A^b_s(1)\pi^{a_2}_{i_2}(2)\rangle_c+\langle A^b_s(1)A^d_s(1)\rangle_c\langle A^c_{i_1}(1)\pi^{a_2}_{i_2}(2)\rangle_c\\
&+\langle A^b_s(1)\rangle\langle A^d_s(1)A^c_{i_1}(1)\pi^{a_2}_{i_2}(2)\rangle_c]\}
\end{aligned}
\tag{13-125}
$$

式中，$\underset{[\cdots]\mathrm{in}(\cdots)\mathrm{order}}{S}$ 表示在保持 $(\cdots)$ 顺序的条件下，对 $[\cdots]$ 内的变量进行对称化运算,$P(x,y,z)$ 是变量 $x,y,z$ 的交换算符, $1,2,y$ 是空间坐标的 $\vec{r}_1,\vec{r}_2,\vec{r}$ 的缩写,$s,i,i_1,i_2$ 代表空间坐标的分量指标,$a,b,c,d,e,a_1,a_2$ 是色指标,$D^s(y)$ 是作用于 $y$ 的规范协变微分的 $s$ 分量。由于胶子场的 3 点和 4 点关联 Green 函数以及顶角函数的运动方程比较复杂，这里不再列出，有兴趣的读者可参阅相关文献[53-57]。

二体约束关联动为学的高斯定律为

$$
\begin{aligned}
&\frac{1}{g}\nabla^j_x\langle p|\pi^a_j(x)\rangle+\langle\psi^+(x)T^a\psi(x)|p\rangle_c\\
&+\frac{1}{2}f^{abc}[\langle p|(\pi^c_j(x)A^b_j(x)+A^b_j(x)\pi^c_j(x))|p\rangle_c\\
&+\langle p|A^b_j(x)|p\rangle\langle p|\pi^c_j(x)|p\rangle]=0
\end{aligned}
\tag{13-126}
$$

最低阶 Ward 恒等式为

$$
\langle p|[g^a(x)g^{a'}(x')-g^{a'}(x')g^a(x)]|p\rangle_{c(xx')}=0 \tag{13-127}
$$

式中，下标 $c(xx')$ 表示在 $x$ 与 $x'$ 之间的关联。高斯算符可写为

$$
\begin{aligned}
g^a(x)=&\frac{1}{g}\nabla^j_x\pi^a_j(x)+\psi^+(x)T^a\psi(x)\\
&+\frac{1}{2}f^{abc}[(\pi^c_j(x)A^b_j(x)+A^b_j(x)\pi^c_j(x)]
\end{aligned}
\tag{13-128}
$$

二体约束关联动力学保证了所有重要的守恒定律。对于反映规范约束条件的高斯定律和 Ward 恒等式，如果它们初始时刻满足，则二体约束关联动力学保证它们在以后任何时刻都满足。至此，我们得到了目前计算机可求解的超越平均场近似的二体约束关联动力学，可用于 QGP 输运问题与介子结构问题。

### 13.4.3 QED 的约束关联动力学

量子电动力学 (QED) 的约束关联动力学 [57,73] 可以类似于 SU($N$) 规范理论建立起来，所得结果比 SU($N$) 情形简单，这里从略。有兴趣的读者可参考相关文献[57,73]。

## 13.5 多体关联动力学的应用

目前，原子核及量子多体关联动力学及其应用的研究已成为国际性的。中外学者在这一领域中所发表的研究论文超过 100 篇。由于受计算条件等因素的限制, 中

国学者的工作主要集中在多体关联动力学基本理论的陈述与发展以及重离子输运理论基本方程的建立与推导等方面。前面正是这些成果的简要介绍。而国外学者，则在多体关联动力学的应用方面做出了多方面的重要贡献。本节将介绍这方面的主要进展。

### 13.5.1 原子核多体关联动力学成为重离子核反应 Giessen 模型的微观理论基础

德国 Giessen 大学理论物理所的 Ceassing，Mosel 等，以王顺金等建立的原子核多体关联动力学作为微观多体理论基础，发展了描述中高能重离子核反应的 Giessen 模型 [11,18]。他们对原子核多体关联动力学的应用以及 Giessen 模型的具体物理内容总结在下面两篇很长的论文中：

"Many-body Theory of High-energy Heavy-ion Reactions" [17] 一文, 主要陈述了 Giessen 重离子核反应模型的量子多体理论基础。首先，他们在 Wang-Cassing 等的非相对论二体关联动力学的基础之上, 在时间有关的 $G$ 矩阵近似下，引述了非相对论性 BUU 方程的非微扰结果。然后，又在 Wang-Cassing 等的相对论性二体关联动力学基础之上，引述了相对论性输运方程的结果。在陈述写这篇长文的目的时，Cassing 和 Mosel 写道:"在这篇评述中，我们在非相对论的量子关联动力学理论框架内提出了理论途径并推导出自洽的相空间分布函数的输运方程"，"一般的理论框架是基于原子核量子关联动力学 (NQCD)，即基于王顺金等于 1985 年提出的一体密度矩阵和二体关联函数的耦合的运动方程，该方程组在半经典极限下导致单体的相空间分布函数的 Vlasov-Uehling-Uhlenbeck(VUU) 方程"。对相对论情形，他们平行地引述了王顺金等的相对论性二体关联动力学的主要结果。

"Production on Energetica Partical in Heavyion Collisions "。文献 [18] 一文中强调:"非相对论极限下的原子核多体问题的动力学是从耦合的一体密度矩阵和二体关联函数的运动方程出发的，该方程组是由 Wang 和 Cassing 从 BBGKY 体系推导而得", 再次指出王顺金等建立的原子核多体关联动力学是 Giessen 模型处理重离子核反应的微观理论基础和出发点。

从二体关联动力学方程推导 BUU 方程，作了两方面的近似：①在对 $C_2$ 的运动方程求解时，作了时间有关的$G$矩阵近似，这相当于在 $C_2$ 的方程中，略去环形图的贡献而保留所有梯形图的贡献。在这种近似下，求得 $C_2$ 的解并代入 $\rho$ 的运动方程，$G$ 矩阵的实部给出自洽平均场，而其虚部导致碰撞项。② 对 $\rho$ 的方程进行 Wigner 变换就过渡到相空间分布函数的描述，这时对平均场和碰撞项都做了半经典近似。因此 BUU 方程实质上是二体关联动力学相空间表示下的半经典近似。

在对 BUU 方程进行数值求解时，Giesen 小组做了进一步的近似处理。由于目前自洽地计算时间有关的$G$矩阵比较困难，Giessen 模型对与$G$矩阵相联系的平均场和碰撞项做了合理的参数化，同时对基本过程的截面做了认真的分析，而对高能光

子、介子 (π、K 等介子) 和轻子对产生等过程的矩阵元做了微扰处理。Giessen 模型对上述过程的描述是令人相当满意的。部分理论计算与实验结果的比较如图 13-1～ 图 13-9 所示。图 13-1 和图 13-2 是关于 $\gamma$ 光子的产生截面，图 13-3 和图 13-4 是关于轻子的产生截面，图 13-5～ 图 13-7 是关于 π 介子的产生截面，图 13-8 和图 13-9 是关于 K 介子的产生截面[17]。

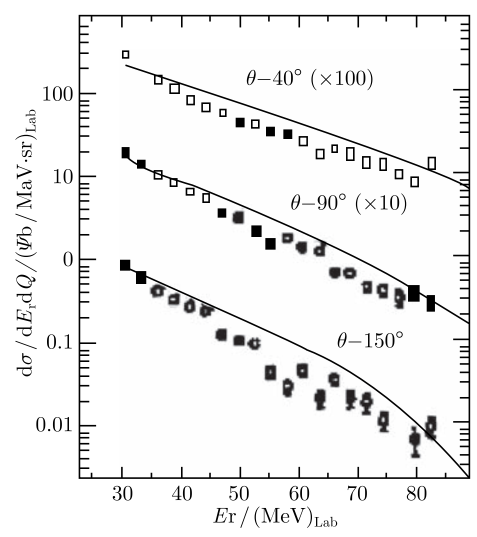



图 13-1 入射能量为每核子 44MeV 时，在 $^{86}$Kr+$^{12}$C 碰撞中，三个实验室角度上，光子的产生截面 $\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}E\mathrm{rd}\Omega\mathrm{r}$

实线是计算结果，数据是 Bertholet 等的实验结果

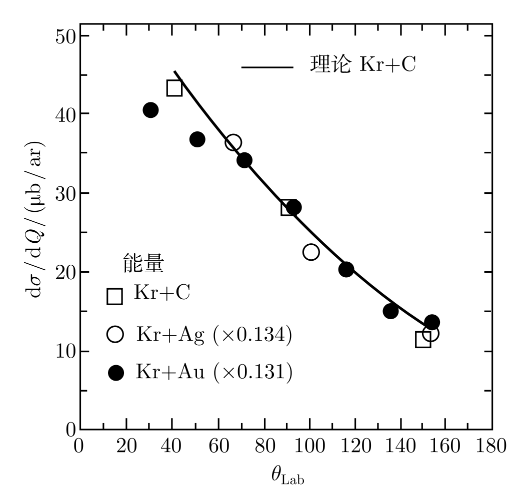



图 13-2 入射能量为每核子 44MeV 的 Kr+C 碰撞中，对能量积分后的光子产生截面 $\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega_{\mathrm{r}}(E_{\mathrm{r}} \geqslant 30\mathrm{MeV})$

实线是计算结果 (仅对 Kr+C)，数据取自 Bertholet 等的实验结果

文献 [17] 和文献 [18] 在国际权威刊物《核物理与粒子物理进展》和《物理学报告》上发表, 并成为当前中高能重离子物理学界广泛引用达 500 多次的重要文献, 这表明原子核多体关联动力学和 Giessen 模型得到了世界的承认和好评。

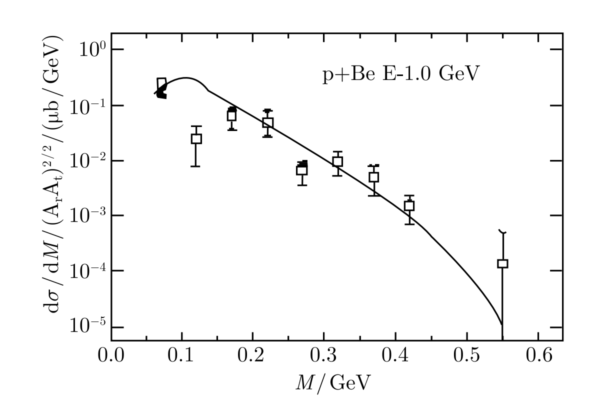



图 13-3 入射能量为每核子 1GeV 的 $p+^{8}Be$ 反应中来自 pn 的轫致辐射的轻子的微分产额

理论计算 (实线) 与 Naudet 等的实验结果的比较

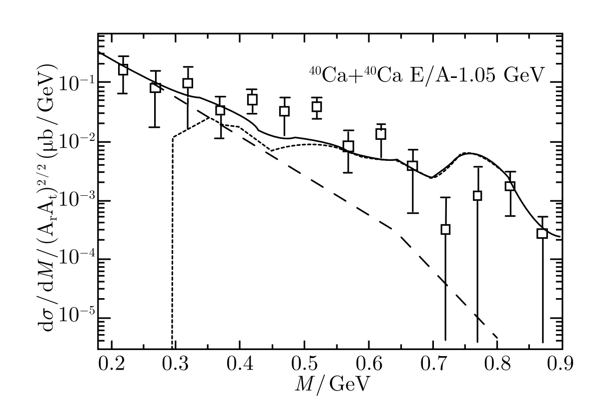



图 13-4 入射能量为每核子 1.05GeV 的 $^{40}Ca+^{40}Ca$ 碰撞中，来自 pn 轫致辐射的轻子的微分产额的计算值

(虚线) 与 Carroll 等的实验结果的比较，点划线给出了来自 $\pi^{+}\pi^{-}$ 湮灭的贡献，而实线是两者共同贡献的结果

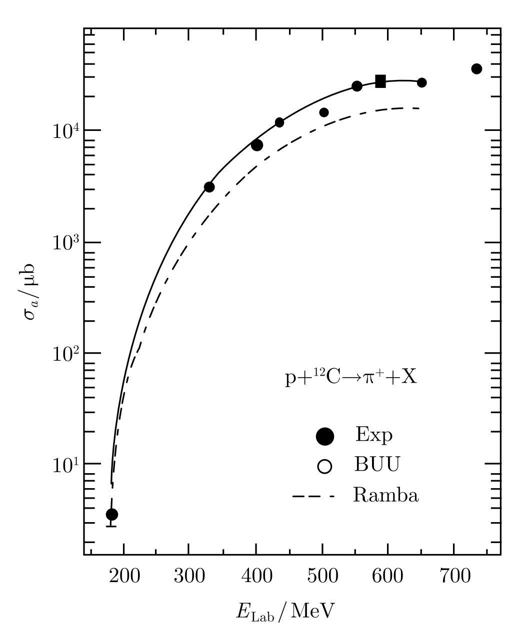



图 13-5　p +$^{12}$ C 反应中的 $\pi^+$ 产额随质子实验室能量的变化关系理论计算与实验数据的比较

实线表示不考虑 π 介子的再吸收 ($\lambda_\pi = \infty$) 的结果，而虚线是 $\lambda_\pi = 5$fm 时得到的计算结果

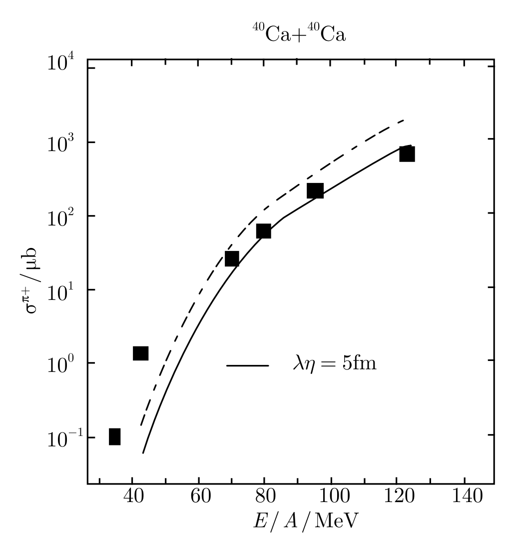



图 13-6　$^{40}$Ca +$^{40}$ Ca 碰撞中,$\pi^0$ 的总产额随单核子入射能量的变化关系理论计算与实验数据的比较

虚线表示不考虑 π 介子的再吸收 ($\lambda_\pi = \infty$) 的结果，

而在实线的计算中采用的 π 自由程是 $\lambda_\pi = 5$fm

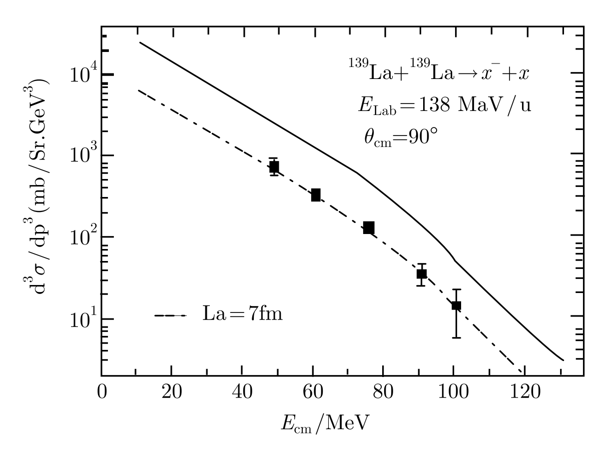



图 13-7 入射能量为 138MeV/$\mu$ 时，$^{139}$La + $^{139}$ La 碰撞中，角度为 $\theta_{\rm cm} = 90°$ 处，π$^-$ 的微分谱，理论计算与 Miller 等的实验结果的比较

实线表示不考虑 π 介子的再吸收 ($\lambda^{\pi^-} = \infty$) 的结果，而虚线是对 $\lambda_{\pi^-} = 7$fm 获得的计算结果

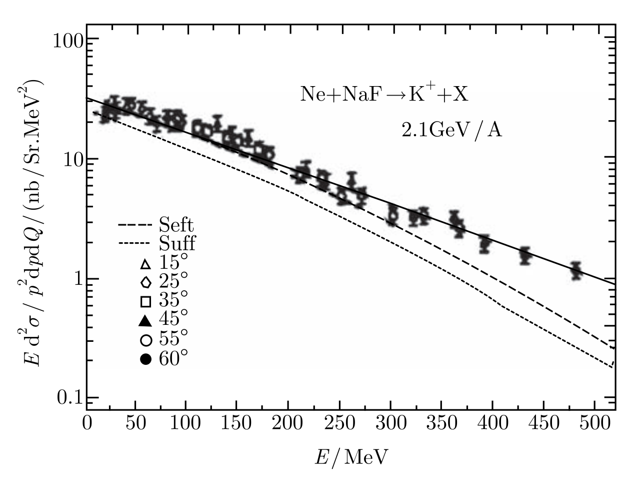



图 13-8 入射能量为每核子 2.1GeV 时，对 Ne + Na 碰撞计算得到的 K$^+$ 谱与实验结果的比较

直线代表用斜率参数 $E_0 = 141$MeV 对实验数据进行指数拟合的结果。虚线是假设压缩系数 $K$=200MeV(软势) 的计算结果，而点划线则代表取 $K$=380MeV(硬势) 时计算得到的 K$^+$ 谱

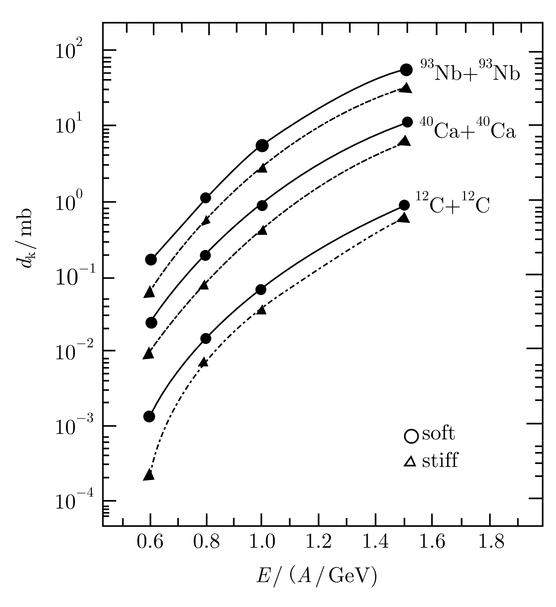



图 13-9　对 $^{12}C+^{12}C$, $^{40}Ca+^{40}Ca$ 和 $^{93}Nb+^{93}Nb$ 碰撞，计算得到的 $K^+$ 介子的单举截面随单核子入射能量的变化关系

实线对应于 $K$=200MeV，点划虚线对应于 $K$=380MeV

### 13.5.2　强子物质输运方程解释了高能核-核碰撞中 π 介子产生的双温能谱和 π 介子发射的偏向性

美国密西根州立大学重离子研究小组的 Li 等运用王顺金等的强子物质的输运方程研究高能重离子碰撞中 π 介子产生的双温现象和 π 介子发射的偏向性[19-23]，对于这个 7 年未能得到解释的实验现象给出了很好的描述。Bauer 和 Li 因此应邀在国际会议上作特邀报告。在其总结性论文“Relativistic Transport Theory and Pion Product of Heavy on Collisìons”[22] 中，Bauer 和 Li 指出“我们提出了一个强子物质的输运理论，能描述单核子能量超过 1GeV 的重离子碰撞”，“我们最近发展的输运理论，使得我们能够对相对论性重离子碰撞过程中的核子、Δ 粒子以及 π 介子的相空间分布函数的时间演化作出详细的理论描述”，“把各种实验数据，包括 π 介子的激发函数及其比值、π 介子的动量分布、π 介子能谱的双温现象以及非对称重离子碰撞中 π 介子的偏向发射等实验数据，与理论计算结果比较表明，我们的模型能恰当地描述相对论重离子碰撞中 π 介子产生的大多数特征”。“这支持下述结论：我们的理论推导中所用的近似是适用的，对这一能区，这一可操作的理论是重要的，并可用来分析和比较将来的实验数据”。

“Pion Spectra in a Hadronic Transport Model for Relativistic Heavy Ion Collisions”[20] 文中给出了王顺金等的强子物质输运方程的数值解[6]，并“集中

研究 π 介子的凸形能谱的形成机制，发现这是由于在碰撞过程中的早期和晚期产生的 Δ–粒子共振态的不同贡献。可资利用的 π 介子能谱的实验数据可由理论再现出来。其结论是，在核子能量达 1GeV 的重离子碰撞中, 介子自由度是必须明显加以处理的，而核的平均场也不能忽略”。

“Preferential Emission of Pions in Asymmetric Nucleus-Nucleus Collusions”[21] 一文报道了用强子输运理论模型 [6,19] 研究重离子碰撞中形成的 π 介子的偏向性发射的结果，并“发现 π 介子从相互作用区向弹核一边的偏向性发射的机制是由于 π 介子被重靶模的再吸收”。

Michigan 小组运用王顺金等的强子物质的输运方程 [6,20,21] 对高能重离子碰撞中 π 介子产生的计算结果与实验数据的比较如图 13-10～ 图 13-15 所示。图 13-10～图 13-13 是关于 π 介子产生双温现象的研究结果，图 13-14 和图 13-15 是有关 π 介子发射的偏向性的研究结果，取自文献 [22]。

### 13.5.3 二体关联动力学解释了热原子核巨共振衰变宽度的温度无关性

Blasio 等运用王顺金等的二体关联动力学方程对热原子核巨共振作了非微扰研究，对于热原子核集体运动研究中的一个六年没有解决的重要问题给出了明确的答案。

在“Nonperturbative Study of the Damping of Giant Resonances in Hot Nuclei[24]”一文中，Broglia 和 Bortignon 等指出：“包括碰撞项的平均场理论的一般形式由 Wang 和 Cassing 给出，它包括一体密度矩阵和二体关联函数的耦合方程组”，“这

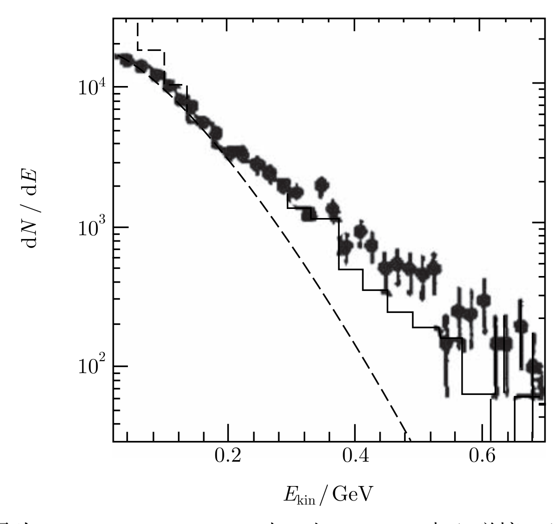



图 13-10 入射能量为 $E/A = 1.35\mathrm{GeV/u}$ 时，对 La + La 中心碰撞，理论计算的 π 产生谱 (直方图) 与实验结果 (带误差线的实的黑圈) 的比较

虚线是对实验结果的低能部分用 $T = 58\mathrm{MeV}$ 的单温度拟合得到的结果

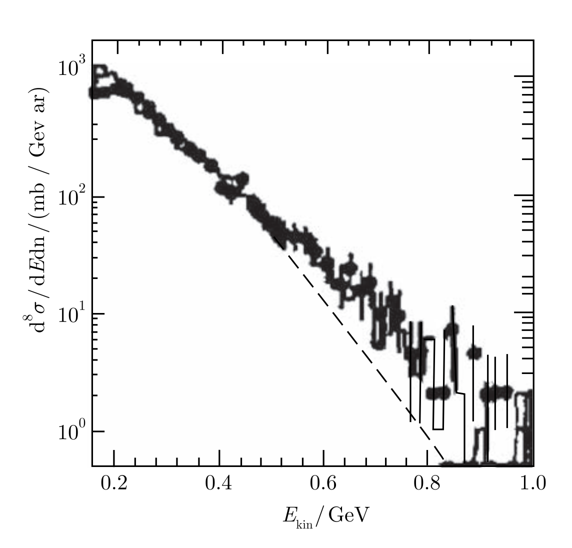



图 13-11　入射能量为 $E/A = 1.8$GeV/u 时，对 Ar+KCl 中心碰撞，理论计算的 π 产生谱 (直方图) 与实验结果 (带误差线的实的黑圈) 的比较

虚线是对实验结果的低能部分的 $T = 63$MeV 单温拟合

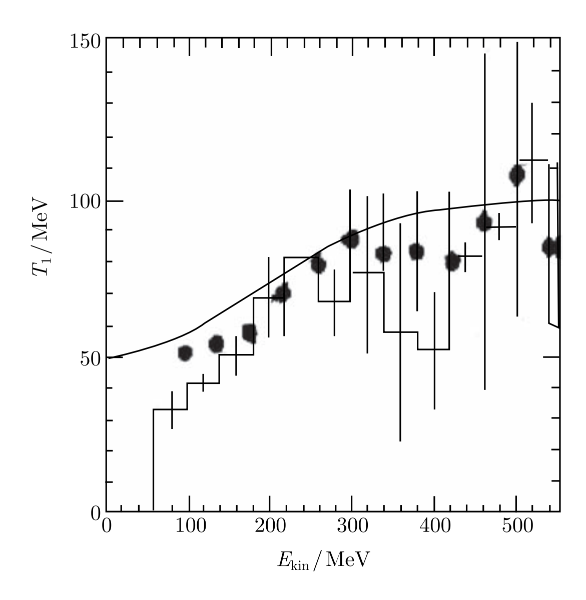



图 13-12　入射能量为 $E/A = 1.35$GeV/u 的 La+La 中心碰撞中，局域斜率 $T_1$ 随 π 介子动能的变化关系

直方图：输运理论的计算结果；实心圆：实验数据，实线代表双温 ($T_1 = 45$MeV, $T_2 = 101$MeV) 拟合的结果

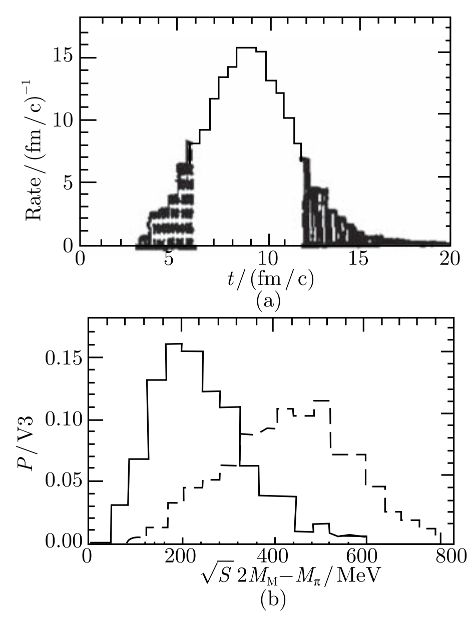



图 13-13 (a) 入射能量为 $E/A = 1.35\text{GeV/u}$ 的 La + La 中心碰撞中，计算的 $\Delta$ 共振的产生率随时间的演化；(b) 核子–核子质心能量的归一化分布

虚线:$t \leqslant 6\text{fm/c}$(图 (a) 中的虚线阴影区)；实线：$t \geqslant 12\text{fm/c}$(图 (a) 中的实线阴影区)

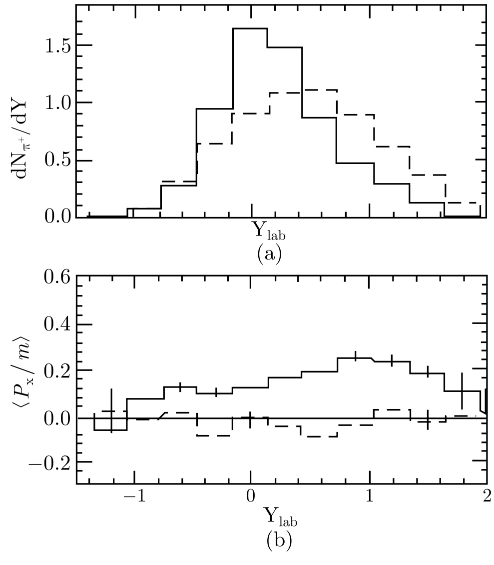



图 13-14 (a) 入射能量为 $E/A = 800\text{MeV/u}$，碰撞参数为 $b = 3\text{fm}$ 的 Ne+Pb 碰撞中，计算得到的 $\pi^+$ 快度分布；(b) 真实反应面内，计算得到的 $\pi^+$ 的横动量分布

图 (a) 和图 (b) 中，实线直方图是考虑了 $\pi^+$ 的再吸收的结果；虚线直方图是没有考虑 $\pi^+$ 的再吸引的结果

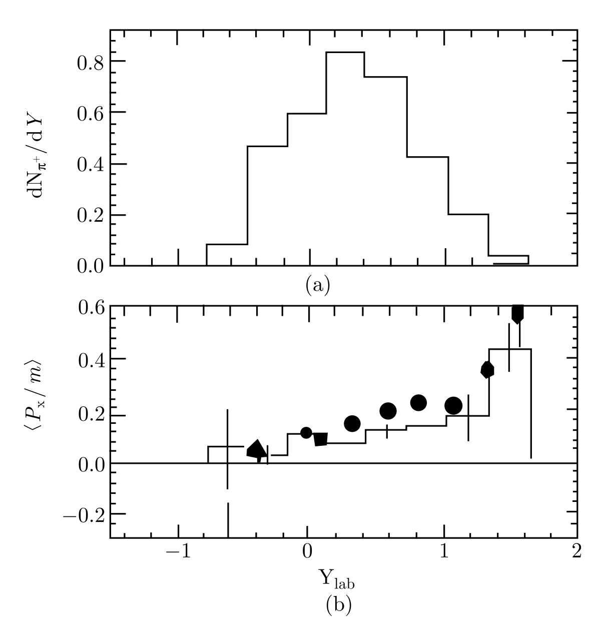



图 13-15 (a) 入射能量为 $E/A = 800\text{MeV/u}$ 的 Ne + Pb 碰撞中，利用探测过滤截断后，计算得到的 $\pi^+$ 快度分布；(b)$\pi^+$ 横动量分布的实验结果 (实心圈) 与模型计算的结果 (直方图) 的比较

一时间有关的密度矩阵理论的方程组，包含了核子–核子之间的碰撞效应到相互作用的无穷级，因而它提供了对原子核运动的非微扰处理”,“本书的结果回答了热原子核集体运动研究中一个长期存在的问题，其答案可以总结如下：与量子小振幅涨落相联系的巨共振衰变宽度与系统的温度无关”,“理论对这一现象提供的简单解释是作为温度函数的 Fermi 面的逐渐丧失伴随着核表面的逐渐丧失。前者有利于碰撞效应，而后者则削弱碰撞效应”。

为了对巨偶极共振 (GDR) 和巨四极共振 (GQR) 进行非微扰研究，意大利 Milano 小组采用二体关联动力学在 TDHF 表象中的形式。首先，需求得 TDHF 的单粒子态，然后把单粒子密度矩阵 $\rho$ 和二体关联 $C_2$ 按这组单粒子态展开，建立起关于 $\rho$ 和 $C_2$ 的展开式系数 $n_{\alpha\beta}$ 和 $C_{\alpha\beta\gamma\delta}$ 的运动方程。巨共振是小振幅集体运动，使得有可能对上述方程组在截断的有限维状态子空间中求解而获得很好的近似。对于 $^{16}$O，$^{32}$S 和 $^{40}$Ca, 其截断的状态子空间为 1s，1p,2s,1d, 2p,1f。对平均场中的二体核力，采用 SkyrmeII 有效核力 (对 GDR) 和 Bonche-Koonin-Negele 有效核力 (对 GQR )。要求在平均场近似下，给出上述核的正确的基态性质，从而确定有效核力的参数。与此同时，对 $C_2$ 的方程中出现的剩余二体相互作用，采用 $v = v_0\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ 形式的短程核力。为了激发巨共振，需要相应地提升算子或激发算子 $\hat{V}(\vec{r})$，它使得参与巨共振的单粒子波函数被提升为 $\exp[\mathrm{i}k\hat{V}(\vec{r})]\psi_\alpha(\vec{r}, t_0)$。对于

GDR，$\hat{V}(\vec{r})=\dfrac{N}{A}z$(对质子) 或 $\hat{V}(\vec{r})=-\dfrac{N}{A}z$(对中子)；对于 GQR，$\hat{V}(\vec{r})=r^2Y_{20}(\Omega)$。在求得 $\psi_\alpha$，$n_{\alpha\beta}$ 和 $C_{\alpha\beta\gamma\delta}$ 之后，可以构造 $\rho$ 和 $C_2$，并计算各种物理量。从多极算子的平均值的计算结果中，可以提取出巨共振频率和宽度等数据。理论计算结果如图 13-16 和图 13-17 所示和见表 13-3，取自文献 [24]。

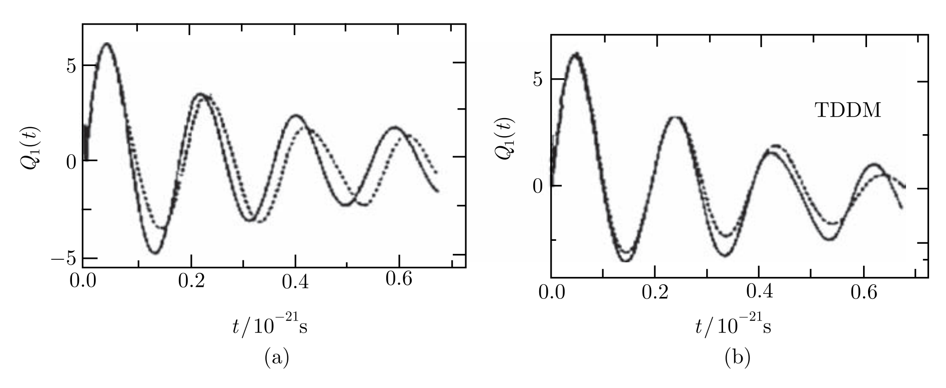



图 13-16 (a) 在 TDHF 近似 (实线) 和 TDDM 近似 (虚线) 下, 温度 $T=0$ 时，计算得到的 $^{40}$Ca 的偶极矩 $Q_1(t)$；(b) 在 TDDM 近似下，温度分别为 $T=0$(实线) 和 $T=4$MeV(虚线) 时，$^{40}$Ca 的偶数矩 $Q_1(t)$ 随时间的演化

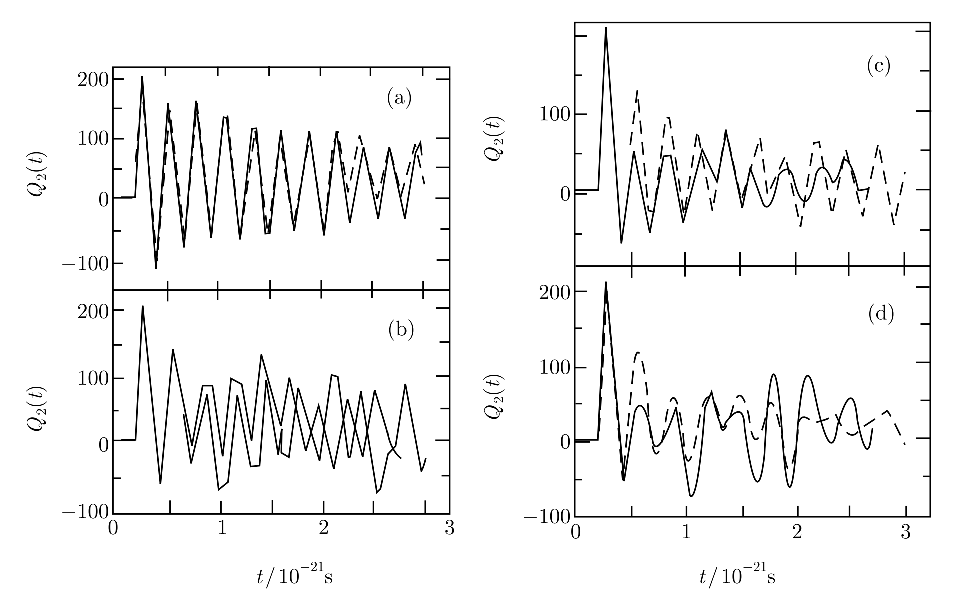



图 13-17 $^{40}$Ca 的四极矩 $Q_2(t)$ 随时间的演化 (a)TDHF；(b)TDHF 加残余“两体碰撞”，$H=0$；(c)TDHF 加涨落，$P=0$；(d)TDDM

实线表示温度 $T=0$ 的情形，虚线是温度 $T=4$MeV 时的结果

**表 13-3**

| | $T$=0MeV | | | | $T$=4MeV | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | TDHF | p-p | p-h | TDDM | TDHF | p-p | p-h | TDDM |
| $2^{+40}$Ca | 0.80 | 1.86 | 5.60 | 5.50 | 0.52 | 1.97 | 2.02 | 2.89 |
| $1^{-40}$Ca | 3.56 | | | 4.12 | 4.37 | | | 4.33 |
| $1^{-16}$O | 6.00 | | | 5.53 | 5.00 | | | 4.90 |

注: 由前三个最大振动的衰变常数提取的四级和偶极模式的衰变宽度的理论值。与 $p$-$p$(particle-particle) 和 $p$-$h$(particle-hole) 对应的列分别表示 $H = 0$ 和 $P = 0$ 时的结果。对于偶极运动，衰减主要来自平均场效应

### 13.5.4 二体关联动力学解释了原子核小振幅运动衰变宽度和重离子碰撞中质量扩散

Tohyama, Randrup 等用王顺金等的二体关联动力学研究原子核小振幅运动和重离子碰撞中的质量扩散，取得很大成功, 解决了一个存在十年的问题。

Cassing 等 [28] 和 Tohyama 等 [29] 证明了二体关联动力学的小振幅极限能提供一个比二阶 RPA 更好的框架，他们还应用二体关联动力学方程计算了重离子碰撞中的质量扩散，得到比 TDHF 好得多的与实验符合的结果。“Small Amplitude limit of the Timedependent matrix Theory” [29] 一文指出:“最近，Wang 和 Cassing 提出了更为一般的 ETDHF 理论，即时间有关的密度矩阵理论 (TDDM)”,“在本文中，我们给出 Wang-Cassing 的 TDDM 理论的小振幅极限”,“我们对 HF 基态给出 TDDM 的小振幅极限 (STDDM) 并将它与现有模型比较，发现 STDDM 是 Swaicki 的二阶 RPA 的推广，因为除了 2p-2h 振幅外，STDDM 包括所有一体和二体振幅。Yannouleas 等的二阶 RPA 可以从 Swaicki 的二阶 RPA 中略去二体振幅之间的耦合得到。而在 1p-1h 和 2p-2h 空间的壳模型, 可以从 Swaicki 的二阶 RPA 中只保留向前振幅得到。因此，STDDM 比上述几种现存理论都更普遍”。

“Applications of a Time-dependent Density Matrix: Formalism l. Small amplitude collective motion” [27] 一文指出:“我们给出的扩展的 TDHF 理论是从 Wang 和 Cassing 的密度矩阵理论推导而来的。这一理论决定一体和二体密度矩阵的时间演化。二体密度矩阵的运动方程包含粒子–粒子和粒子–空穴关联到无穷级。理论被用于 $^{16}$O 和 $^{40}$Ca 的小振幅四极运动，得到的衰变宽度及其质量相关性与实验数据符合。发现 2p-2h 关联对于四极运动的衰减是至关重要的”。

作为上文的延续，文献 [30] 把 TDDM 应用于衰减的核反应中的质量分布问题，“发现用 TDDM 算得的质量扩散比 TDHF 大 2.5~3 倍。TDDM 的结果与核子交换输运模型 (NET) 的结果是同一个数量级，而 NET 模型对很多核反应能再现实验数据”。(见表 13-4 给出的 TDHF,TDDM 和 NET 模型计算得到的质量扩散

$\sigma_A$ , 取自文献 [30]。)

“Landou’s Collision term in Time-dependent Density Matrix Formalism”[31] 一文证明，巨共振扩展宽度的 Landau 表达式能够从 Wang 和 Cassing 提出的时间有关的密度矩阵理论 (TDDM) 的小振幅极限得到。

**表 13-4 TDHF,TDDM 与 NET 模型计算得到的质量扩散 $\sigma_A$**

| | $\sigma_A$ | |
|---|---|---|
| | $L$=0h | $L$=40h |
| TDHD | 0.8 | 0.4 |
| TDDM | 2.0 | 1.2 |
| NET | 2.7 | 1.5 |

### 13.5.5 二体关联动力学对重离子碰撞中碎裂现象的描述

重离子核反应属于大振幅运动，若仍用球对称 TDHF 表象，则基矢 $\psi_\alpha$ 的数目必须非常大，才能较好描述大振幅运动，这在计算上是难于实现的。必须寻找另外的、更合适的表象。研究表明，时间有关的高斯波包表象 (或时间有关的相干态表象)，对于描述像重离子核反应这样的大振幅量子运动是方便的。王顺金、刘建业等把二体关联密度矩阵动力学方程在运动的高斯波包表象中求解，建立了重离子核反应的二体关联输运理论 (TBCTT)，用它对重离子碰撞中的核碎裂现象做了很好的描述[91]。

### 13.5.6 在凝聚态物理和介观物理方面的应用

罗洪刚、王顺金等成功地运用关联 Green 函数动力学处理凝聚态强关联电子系统和介观系统，在 PRB 和 PRL 等 SCI 期刊上发表了一系列论文。处理的问题包括 Hubbard 模型和 Anderson 模型的非微扰求解，介观 AB 环的电流输运, Kondo 效应, shot noise 和 Fano 共振等。他们得到了正确的近藤温度公式中的指数表达式，解释了金 (银) 表面的安德森杂质 (Ti/Au(Ag)) 的态密度谱和碳纳米管自旋轨道耦合力对近藤效应的影响等[93-105]。

近年，Axt, Mukamel, Hohenster 和 Potz 等把关联动力学用于介观团簇物理。团簇物理专家 V.M.Axt 等基于多体关联动力学思想, 发展了激光驱动的半导体和分子纳米团簇结构中激子和声子的关联动力学理论。他们在 Review of Modern Physics 70(1998)145 中, 把量子关联动力学作为他们建立激子和声子关联动力学方程的依据和向导[106,107]。

### 13.5.7 关联动力学在其他方面的应用

原子核和量子多体关联动力学的应用还在继续。运用两体关联动力学分析非绝

热的耗散动力学[2], 研究重离子碰撞中的两体效应[84] 和单粒子自由度的弛豫[85,86], 用二体关联动力学定态方程研究多体系统的基态关联[87], 比较核子–核子碰撞的量子力学处理与半经典处理[88]，描述丰中子核的巨共振[88], 用关联 Green 函数动力学方法研究 $\phi^4$ 模型中基态对称性破缺[90] 等都是这方面的工作。近年，日本核物理学家 Tohyama 用两体关联动力学处理双声子巨共振取得了成功。Tohyama 应用二体关联动力学于核物理的工作，一直持续到现在，成为这个领域内卓有成效的著名专家[108-123]。

## 13.6　结论和展望

### 13.6.1　原子核和量子多体关联动力学的特征

现在分析一下原子核和量子多体关联动力学的一些特征。首先，原子核多体关联动力学有下述系统论的特征：①它以多体关联子结构作为理论的基本要素，而多体关联子结构按复杂程度分为不同的层次；②它既能够描述不同层次的多体关联子结构的相对独立性，又能凸现它们之间的相互耦合，这正体现出多体系统结构的层次性和有机整体性；③它提供了一种自然的、合理的截断方案，使得严格的多体方程组系列在截断后成为有限数目的运动方程组，因而能够数值求解。

多体关联动力学的上述特征是基于以下一些客观事实。在原子核结构与原子核反应中 (以及一般量子多体系统中),原子核的多体关联在客观上的确以层次的形式表现出其相对的独立性，并在不同问题和不同侧面中表现出不同的重要性。因此，在统一的原子核多体理论中，必须以多体关联运动为基本要素，才能客观地反映出原子核结构和运动中的层次结构特征，也只有抓住多体关联这些基本要素，才有可能将彼此分离的、具体的原子核多体理论统一起来。虽然一般的原子核多体理论已经给予我们许多有益的启示，为多体关联理论的建立奠定了必要的基础。但是，这些一般性的多体理论的主要缺点是没有将关联运动子结构明显地、系统地分离出来，而且不便于作截断近似，这正是需要在统一的多体关联理论中加以克服的。

本书从物理学思想发展的角度，论述了原子核结构与原子核反应理论的发展以及描述量子多体关联运动的思想的演化，分析了原子核和量子多体联动力学的发展过程及其基本特征。在评述中，我们发现了也强调了原子核和量子多体理论的发展趋势，即从微扰论向多体关联理论的发展。当进一步将原子核和量子多体系统看成一个一般多体系统，把多体关联与系统结构的层次性联系起来时，人们可以看到，原子核和量子多体关联理论的发展趋势，是物理学发展中的系统论倾向的一个侧面[92]。

其次，原子核和量子多体关联动力学的另一个特点在于它的统一性和概括力。它将笼统的、没有分化的、未显示出层次结构的量子多体动力学理论，转变为明

显的、分化了的、显示出层次结构的量子多体动力学理论，从微观多体相互作用的角度，以统一的形式去理解和描述各种形式的多体关联运动。这正好与原子核和量子多体系统中客观存在着的、从低阶到高阶的多体关联运动模式相对应，也是原子核和量子多体关联动力学具有统一性和概括力的物理根源。

作为描述原子核和量子多体关联的一种统一的理论形式，它应把现有的各种分散的原子核和量子多体理论统一起来，作为它不同截断近似下的结果。研究表明，原子核和量子多体关联动力学的确具有这样的性质，它与一些常用的原子核和量子多体理论的关系如表 13-5 所示。

### 13.6.2 展望

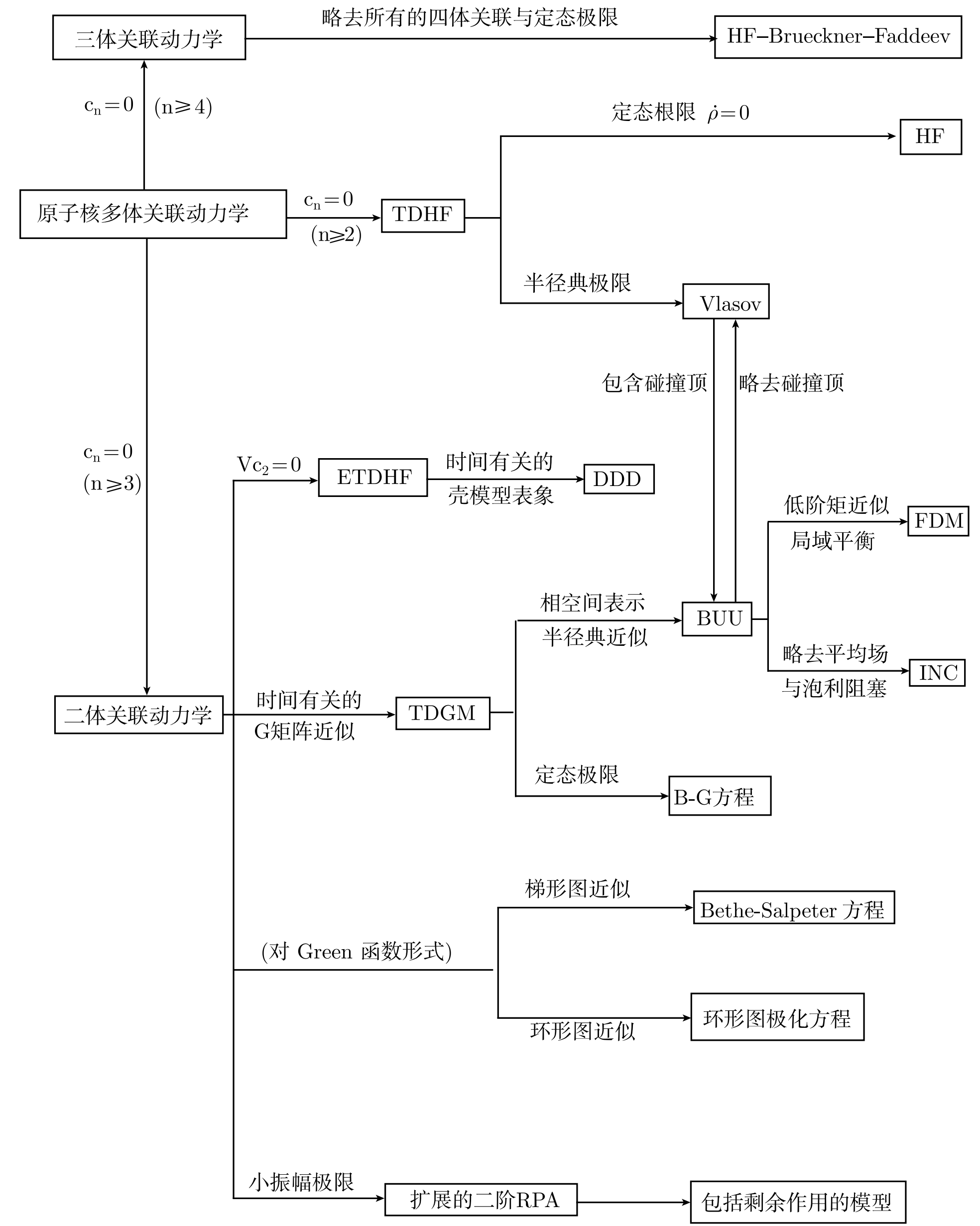
在这一章中，我们论述了原子核和量子多体关联动力学的发展线索，详细介绍了描述量子关联运动模式的三种理论形式：多体关联密度矩阵动力学、多体关联 Green 函数动力学和量子场论中的约束关联动力学。这将有助于人们理解多体关联动力学的基本思想和基本方法。我们希望量子多体关联动力学的思想与方法，通过它在原子核物理学和凝聚态物理中的应用及其非微扰的、对多体关联效应逐次逼近的计算方法，能够在量子多体问题的研究中发挥更大的作用。

我们关心的第一个问题是低阶关联动力学的应用问题。为了应用，必须能够求解。二体关联动力学在建立重离子核反应微观输运方程方面发挥了重要作用。但是三维空间中的二体关联动力学方程组仅对小振幅运动在截断的状态空间内实现了数值求解。对于大振幅运动 (如重离子碰撞)，用二体关联动力学描述轻原子核碰撞，运用时间有关的相干态表象，在数值求解方面虽然取得一些进展，但对中重原子核碰撞问题的数值求解，仍然是一个尚未解决好的问题。随着计算机技术的发展，这一问题在不久的将来能够得到解决。与此同时，在建立起温度有关的关联 Green 函数方法之后，我们希望温度有关的二体关联 Green 函数动力学能够在高温超导的研究中发挥作用。

我们关心的第二个问题是相对论性量子场的关联动力学，特别是 QCD 的约束关联动力学的应用与求解。这一目标的实现，将为人们提供一个系统的、非微扰的量子场论方法。这不仅有助于理解强子结构与夸克禁闭以及夸克–胶子等离子体输运问题，而且有助于将原子核物理学建立在夸克–胶子动力学的基础之上。显然，这一目标的实现是十分艰巨但非常诱人的。

在量子多体理论中，人们发现有两种有效的非微扰方法。一种是动力学群方法，它在原子核结构的研究中获得了很大的成功。另一种是这里介绍的多体关联动力学方法。我们希望能将这两种方法结合起来，使它们各自的优点得以充分发挥。动力学群方法的优点在于它的代数的与解析的求解方法，特别是把整个 Hilbert 空间按动力学群不可约表示子空间约化，使物理上有效的 Hilbert 空间维数和计算工

**表 13-5　原子核多体关联动力学与其他多体理论的关系 (以多体关联密度矩阵动力学为例)**




作量大大减少，这正是多体关联动力学方法所迫切需要的。在内部自由度空间，这两种方法的结合在 QCD 的约束关联动力学已得到部分实现 (用代数动力学方法处理规范约束条件)。在第 15 章“系统–环境耦合动力学”中，我们发现，在具有代数结构的量子系统 (如介观量子信息系统) 中，代数运动模式和关联运动模式的交织，

代数动力学方法和关联动力学方法的结合，得到了完美的实现。

## 13.7 致 谢

本章是在作者与左维博士和郭华博士联合撰写的总结性论文[124] 的基础之上经过修改、扩充写成的。作者深深感谢 Cassing、Bauer、李保安、左维、郭华、罗洪刚和刘建业等教授，由于与他们长期而富有成效的合作，使“量子多体关联动力学”具有丰富的物理内容, 并在原子核物理和凝聚态物理中获得成功的、令人瞩目的应用。作者对郭华教授不幸英年早逝表示深切的惋惜和沉痛的哀悼。

作者深深感谢胡济民先生、吴式枢先生、杨立铭先生和徐躬耦先生长期对我们关于“关联动力学”工作的关怀、鼓励与支持。“关联动力学”的总结性论文 [124] 就是在胡济民先生的建议下写成的，胡济民先生、杨立铭先生、徐躬耦先生和吴式枢先生仔细阅读了那篇论文的初稿，并提出许多宝贵的意见。这项工作得到国家自然科学基金、教育部博士点基金、兰州重离子加速器国家实验室原子核理论中心科学基金的长期支持，作者在此表示感谢。

## 参 考 文 献

[1] Wang S J, Cassng W. Ann. Phys, 1985: 328.

[2] Wang S J. Commun. Theor. Phys, 1985, 4:827.

[3] Cassing W, Niitak, Wang S J Z. Phys, 1988, A331: 439.

[4] Wang S J, Cassing W. Nucl. Phys, 1989, A495: 371.

[5] Cassing W, Wang S J Z. Phys, 1990, A331: 1.

[6] Wang S J, Li B A, Bauer W, et al. Ann Phys, (N. Y.) 1991, 209: 251.

[7] Wang S J, Li B A, Bauer W, et al. Proc of Symposum on Heavy Ion Physics and Its Applications, 1990: 11–14. Shen W Q et al ed. World Scientific. Singapore, 1991, 493.

[8] 左维, 玉顺金. 高能物理与核物理. 1992, 16: 840.

[9] 左维, 王顺金. 高能物理与穰物理. 1992, 16: 1050.

[10] 左维, 王顺金. 高能物理与核物理. 1993, 17: 179.

[11] 左维. 多体关联 Green 函数动力学. 兰州大学博士学位论文, 1992.

[12] Wang S J, Zuo W, Cassing W. Nucl Phys, 1994, A573: 245.

[13] Zuo W, Guo H, Wang S J. Commun Theor Phys, 1994, 22: 213.

[14] Wang S J, Casing W, Thoma M. Phys Lett, 1994, B324: 5.

[15] Wang S J, Li F L, Weiguny A. Phys Lett, 1993, A180: 189.

[16] Cassing W, Wang S J. Z Phys, 1987, A321: 423.

[17] Cassing W, Mosel U. Progr. Part and Nucl Phys, 1990, 25: 235.
[18] Cassing W, Metag V, Mosel U, et al. Phys Rep, 1990, 188: 363.
[19] Li B A, Bauer W. Phys Lett, 1991, B254: 335.
[20] Li B A, Bauer W. Phys Rev, 1991, C44: 450.
[21] Li B A, Bauer W, Bertsch G F. Phys Rev, 1991, C44:2095.
[22] Bauer W, Li B A. // Kodama T, et al. Intenational Workshop on Relativisc Aspectls of Nudear Physlcs. 2nd ed. Singapore: World Scientific, 1991：229.
[23] Bauer W, Li B A, Wang S J, et al. // Bauer W, Kapusta J. Proc of the 7th Winter Workshop on Nuclear Dynamics. Singapore: World Scientific, 1992, 210.
[24] de Blasio F V, Cassing W, Tohyama M, et al. Phys Rev Lett, 1992, 1663.
[25] Tohyama M. Phy Rev, 1987, C36: 187.
[26] Tohyama M. Phys Rev, 1988, C38: 553.
[27] Gong M, Tobyama M. Z Phys, 1990, A335: 153.
[28] Cassing W, Pfitzner A. Z Phys, 1990, A337: 175.
[29] Tohyama M, Gong M. Z Phys, 1989, A332: 269.
[30] Gong M, Tohyama M, Randrup J. Z Phys, 1990, A33S: 331.
[31] Tohyama M. Z Phys, 1990, A335: 413.
[32] Rajaraman R, Bethe H A. Rev Mod Phys, 1967, 39: 745.
[33] Bethe H A. Ann Rev Nucl Sci, 1971, 21: 93.
[34] Day B D Rev Mod Phys, 1978, 50: 495.
[35] Ripka G, Proneuf M. Nuclear Sell-consistent Fields. Amsterdam: North-Holland, 1975.
[36] Coester F. Nucl Phys, 1958, 7: 421.
[37] Coester F, Kummel H. Nucl Phys, 1960, 17: 477.
[38] Kummel H, Luhrmann K H. J G Z bolitzky Phys Rep, 1978, 36:1.
[39] Monkhorst J H. Quanum Chem, 1971, 511: 421.
[40] Hoodhoy P, Negele J W. Phy Rev, 1978, C18 :2380; Hoodhop P, Negele JW. Phy Rev, 1979, C19: 1971.
[41] Arponen J. Ann Phys, (N. Y), 1993, 151: 311.
[42] Ftter A L, Walecka J D. Quantum Theory of Many Particle Syatem. McGraw Hill Book Company, 1971.
[43] 蔡建华, 龚昌德, 跳希贤, 等. 量子统计的 Green 函数理论. 北京：科学出版社, 1982.
[44] Kadanoff L P, Baym G. Quantum Statistical Mechanics. W A Benjamin, 1962.
[45] Chou K C, Su Z B, Hao B L, et al. Phys Rep, 1985, 118:1.
[46] Martin P C, J Schwinger. Phy Rev, 1959, 115: 1342.
[47] Wong C Y, Tang H K. Phys Rev Lett, 1978, 40:1070.
[48] Wong C Y, Tang H K. Phys Rev, 1979, C20: 1419.
[49] Prigogine J. Non-equilibrium Statistical Mechanics. Intenscience Publishers, 1952.
[50] Wang S J, Noerenberg W. Scientific of Report GSI. 1982: 92.

[51] Niita K, Noerenberg W, Wang S J. Z Phys, 1987, A326: 69.
[52] Feynman R P. Phys Rev. 1949, 76: 169, 749.
[53] Wang S J, Cassing W, Hauser J M, et al. Ann Phys, (N. Y. ), 1995, 242: 235.
[54] 玉顾金, 郭华. 高能物理与核物理. 1995, 19: 211.
[55] 玉顺金, 郭华. 高能物理与核物理. 1995, 19: 332.
[56] 郭华, 王顺金. 高能物理与核物理. 1995, 19: 455.
[57] 郭华. 量子场论中的关联动力学. 兰州大学博士学位论文, 1994.
[58] Andreev L V, Plucr M, Wigner R M. Phys Rev Lett, 1991, 16: 3475.
[59] Itzyson C, Zuber J B. Quantum Field Theory. McGraw-Hilll Inc, 1980.
[60] Cooper F, Feigenbaum M F. Phy Rev, 1976, D14: 583.
[61] Lee T D. Particle Physics and lntroduccion to Field Theory. Chur: Harwood, 1981.
[62] Huang K. Quark, Leptons and Gauge Field. Singapore : World Scientific, 1982.
[63] Quigg C. Gauge Theories of the Strong, Weak and Electromagnetic Interactions. CA: Benjamin-Cummings, 1983.
[64] Creutz M. Quark, Gluons and Lattice. New York: Cambridge University Press, 1983.
[65] Schutte D. Phys Rev, 1985, D31: 810.
[66] Mandelstom S. Phys Rev, 1979, D20: 3223.
[67] Elze H T, Heinz U. Phys Rep, 1989, 183: 81.
[68] Christ N H, Lee T D. Phys Rev, 1980, D22: 939.
[69] Dirac P A. Canad J Math, 1950, 2: 129.
[70] Dirac P A. Proc Roy Soc, 1958, A246: 326.
[71] Dirac P A. Lectures on Quantum Mechanics. New York: Yeshiva University Press, 1964.
[72] Castellani L. Ann Phys, 1982, 143: 35.
[73] 郭华, 王顺金. 高能物漂与核物理. 1996, 20(1): 48; 高能物漂与核物理. 1996, 20(2): 131.
[74] Betholet R, et al. Nucl Phys, 1987, A474: 541.
[75] Nauder C, et al. Phys Rev Lett, 1989, 62: 2652.
[76] Catroll J. Nucl Phys, 1989, A495: 409.
[77] Crawford J F, et al. Phys Rev, 1980, C22: 1184; Nagamiya S. et al. Phys Rev, 1981, C24: 971; Krasnov V A. Phys Lett, 1982, B108: 1780. DiGiacomo N J. et al. Phys Rev, 1985, C31: 292.
[78] Nagamiya S, et al. Phy Phys Lett, 1982, 48: 1780. Stache1 J, et al. Phys Rev, 1986, C33: 1420; Noren B, et al. Nucl Phys, 1988, A489: 763.
[79] Miller J, et al. Phys Rev Lett, 1987, 58: 2408.
[80] Nagamiya S, Gyulassy M. Adv Nucl Phys, 1984, 13: 201.
[81] Odymiec G, et al. Proc of the 8th High Energy Heavy Ion Study. Lawrence Berkeley Report, 1988, LBL-24580: 215.
[82] Brockmann R, et al. Phys Rev Lett, 1984, 53: 2012.

[83] Gosser J, et al. Phys Rev Lett, 1989, 62: 1251.
[84] 葛凌霄, 刘建业, 王顺金. 高能物理与核物理. 1987, 11: 659.
[85] 葛凌霄, 划建业, 王顺金. 高能物理与核物理. 1989, 13: 251.
[86] Ge L X, Liu J, Wang S J. Chinese Physics, 1990, 10: 368.
[87] Tohyama M，Schuck P, Wang S J. Z Phys, 1991, A339: 341.
[88] Tohyama M. Nucl Phys, 1993, A563: 494.
[89] Tohyama M. Phys Lett, 1994, B313: 257.
[90] Haueser M, Cassing W, Peter A, et al. Z Phys, 1995, A353: 301; Z Phys, 1996, C71: 515.
[91] Liu J Y, Wang S J, di Toro M, et al. Nucl Phys, 1996, A604: 341.
[92] 王顺金, 曹文强. 自然辩证法研究, 1992, (2): 6.
[93] Luo H G, Ying Z J, Wang S J. Phys Rev, 1999, B59: 9710.
[94] Luo H G, Wang S J. Phys Rev, 1999, B60: 15480.
[95] Luo H G, Wang S J. Phys Rev, 2000, B61: 13418.
[96] Luo H G , Wang S J. Phys Rev, 2000, B61: 5158.
[97] Luo H G , Wang S J. Phys Rev, 2000, B62: 1485.
[98] Luo H G , Wang S J. Phys Rev, 2000, B62: 5341.
[99] Luo H G, Jia C L, Wang S J, et al. Phys Rev, 2002, B65: 075108.
[100] Luo H G, Jia C L, Wang S J. Phys Rev, 2002, B66: 235311.
[101] Zhang G B, Wang S J, Li L. Phys Rev, 2006, B74: 085106.
[102] Fang T F, Wang S J, Zuo W. Phys Rev, 2007, B76: 205312.
[103] Fang T F, Wang S J. Journal of Phys Condensed Matter, 2007, 19: 026204.
[104] Luo H G, Xiang T, Wang X Q, et al. Phys Rev Lett, 2004, 92: 256602.
[105] Fang T F, Zuo W, Luo H G. Phys Rev Lett, 2008, 101: 246805.
[106] Axt V M, Mukamel S.Rev Mod Phys, 1998, 70(1): 145.
[107] Hohenster U, Potz W, Mukamel S.Phys Rev, 1997, B56(20): 13177. J Chem Phys, 1996, 105(9): 3679.
[108] Tohyama M. Progr Theor Phys, 1998, 100(6): 1293.
[109] Tohyama M. Phys. Lett.2000, B484: 231.
[110] Tohyama M, et al. Phys Lett, 2001, B516: 415.
[111] Tohyama M. Phys Rev, 2001, C64: 067304.
[112] Tohyama M, et al. Phys Rev, 2001, C65: 037601.
[113] Tohyama M, et al. Phys Lett, 2002, B549: 72.
[114] Tohyama M, et al. Eur Phys J, 2004, A19: 203.
[115] Tohyama M, et al. Eur Phys J, 2004, A19: 215.
[116] Tohyama M, et al. Eur Phys J, 2004, A21: 217.
[117] Tohyama M, et al. Progr Theor Phys, 2004, 112(3): 499.
[118] Tohyama M. Progr Theor Phys, 2005, 114(5): 1021.

[119] Tohyama M. Phys Rev, 2007, C75: 044310.
[120] Tohyama M, et al. Eur Phys J, 2007, A32(2): 139.
[121] Tohyama M, et al. Eur Phys J, 2008, A36(3): 349.
[122] Tohyama M, J Phys Sci, 2009, 78(10): 104003.
[123] Tohyama M, et al. Eur Phys J, 2010, A45(2): 257.
[124] 王顺金，左维，郭华. 原子核多体关联动力学 —— 量子多体理论的一种非微扰途径. 物理学进展，1996, 16(1): 99.

# 第 14 章　量子对称运动模式和代数动力学

本章从控制与利用微观系统的量子工程的观点，讨论了人造量子系统的基本物理问题。针对人造量子系统中的一大类具有代数结构的非自治量子系统的对称性运动模式的求解问题，提出了代数动力学理论方法。运用代数动力学，对这类人造量子系统进行了理论研究。对可积的非自治系统，详细介绍了线性系统和非线性可积系统的求解问题；对不可积系统，用代数动力学观点研究了量子规则运动和无规运动的特征，它们之间的过渡以及它们对时间有关外场的不同响应。还介绍了用代数动力学研究具有代数结构的量子统计力学系统以及用代数动力学研究量子信息系统中的团簇量子位、一位通用量子逻辑门和两位量子控制非门的具体结果。

## 14.1　人造量子系统与非自治量子系统

### 14.1.1　人造量子系统

人类已进入控制单个原子、电子等微观粒子的时代。目前，人类能够做到：①用隧道扫描电镜探针搬动单个原子 (1986 年诺贝尔物理学奖)[1]；②用电磁陷阱 (paul trap) 捕捉单个电子、离子甚至原子 (1989 年诺贝尔物理学奖)[2] ；③用激光束捕捉与冷却原子产生 Bose-Einstein 凝聚 (1997 年诺贝尔奖)[3] ；④用腔场量子电动力学技术控制原子状态和光子的统计性质[4] ；⑤在介观尺度设置人造势场和人造边界条件控制微观粒子的运动[5] 。将来，人类可能做到用双能级原子 (或其他双能级量子系统) 作记忆和开关元件，用量子动力学演化进行量子计算，实现量子通信与量子计算机[6] 。

上述事实表明，人类已从控制与利用大量微观粒子系综的时代进入控制与利用单个微观粒子的时代。人类应当自觉认识到这一新的形势与机遇，及时为自己提出新的战略性的研究课题，即 “人类控制与利用微观系统 (量子工程) 的基本物理与技术问题”。

这一课题的研究将直接影响与促进 21 世纪下列新科技领域的发展，并可能开辟新的前沿领域：

(1) 介观电路与半经典计算机。计算机进一步集成化与小型化将要求其基本元件进入介观领域，这种计算机的硬件设计必须考虑介观电路中的量子效应。以介观

元件为基础的计算机将是一种半经典计算机，它基本上是宏观的，但考虑了介观元件中的量子效应。

(2) 非经典激光通信。以非经典激光 (如压缩态激光) 为载体的激光通信将大大提高通信密度与信噪比。

(3) 量子通信与量子计算机。以双能级原子或双能级团簇量子态为记忆单元、开关电路和信息储存形式，以量子动力学演化为信息传递与加工基础的量子通信与量子计算机将成为现实。

(4) 单原子事件的碰撞、反应动力学。对微观粒子进行的单一碰撞、反应过程的研究将提供微观世界新的更精确的信息，改变原子、分子物理学和化学的面貌，为材料科学提供新的应用前景。

(5) 原子组装和单个量子过程的其他应用。人们通过设置人工势场和人工边界条件的办法去控制微观粒子的量子运动。这种在人工势场和人工边界条件下运动的微观粒子系统称为人造量子系统。按照人工势场和边界条件是否依赖于时间，人造量子系统可分为自治的和非自治的两大类。若人造势场或边界条件不依赖于时间，则系统称为自治的；反之，则称为非自治的。

### 14.1.2 非自治系统

非自治系统的 Hamilton 量或边界条件通过某些参数依赖于时间。这些随时间变化的参数体现了人类或环境对系统的影响。非自治系统可以是经典的，也可以是量子的。

非自治量子系统的研究是量子力学研究的一个前沿，反映出人类对量子系统认识的深化和人类控制微观系统的能力的增强。非自治量子系统的种类很多，下面列举几个典型的非自治量子系统。有趣的是，这些人造的非自治量子系统都具有某种动力学代数结构，它们的名称及其 Hamilton 量的代数结构见表 14-1，图 14-1 则是这些系统的示意图。

**表 14-1 几种重要的非自治量子系统及其代数结构**

| 系统名称 | Hamilton 量 $H$ 的代数结构 | 系统的示意图 |
|---|---|---|
| Paul 阱中粒子的量子运动 | $H(\mathrm{su}(1,1),\alpha(t))$ | 图 14-1(a) |
| 束流动力学中粒子的极化 | $H(\mathrm{su}(2),\alpha(t))$ | 图 14-1(b) |
| 原子与腔场的相互作用 | $H(\mathrm{su}(N),\alpha(t))$ | 图 14-1(c) |
| 螺旋光纤中激光的贝利相位 | $H(\mathrm{su}(2),\alpha(t))$ | 图 14-1(d) |
| 时间有关的 Landau 系统 | $H(\mathrm{sp}(4)\oplus h(3),\alpha(t))$ | 图 14-1(e) |
| 核子在变化的四极平均场中的运动 | $H(\mathrm{sp}(6),\alpha(t))$ | 图 14-1(f) |

一维 Paul 阱中粒子的量子运动构成 su(1,1) 动力系统[7−15]；加速器中带自旋粒子的极化是 su(2) 动力系统[16]；$N$ 能原子与腔场交换光子的过程是非线性系统，

但可以线性化为 su($N$) 动力系统[17−20]；带自旋粒子在转动磁场中和螺旋光纤中激光的贝利相位是 su(2) 动力系统[21,22]；带电粒子在均匀可变的磁场和电场中的运动 (推广的时间有关的 Landau 系统) 是 sp(4)$\oplus h$(3) 动力系统[23−25]；核子在变化的四极平均场中的运动是 sp(6) 动力系统[26,27]…… 在 14.3 节中，将研究更多的人造量子系统，它们是线性的或非线性的，但具有动力学代数结构，成为美妙的代数动力系统。

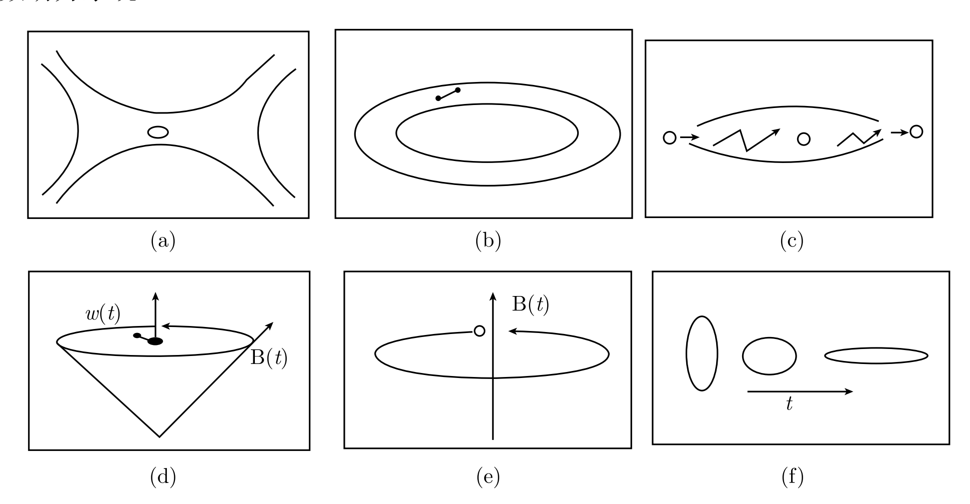



图 14-1(a) Paul 阱中粒子的量子运动; (b) 回旋加速器中粒子的极化; (c) $N$ 能原子与腔场相互作用; (d) 螺旋光纤中激光的贝利相位; (e) 带电粒子在时间有关的均匀磁场中的量子运动; (f) 核子在变化的四极平均场中的运动

大多数人造量子系统是非自治的，这就要求发展非自治系统量子力学。研究非自治量子系统的重要性在于人们可以通时间有关的势场或边界条件，实现对微观粒子的控制，达到为人类所用的目的。

### 14.1.3 代数动力学的起因

随着人类控制微观粒子的实践深入，人造量子系统的量子力学问题，特别是非自治系统量子力学问题，成为量子论的一大研究前沿。量子物理的另一发展前沿是动力学对称性理论[28−30]。这一理论发源于原子核物理学的 Elliott su(3) 转动模型[31] 和粒子物理中的 Gell-Mann su(3) 夸克模型[32] ，在 20 世纪 70~80 年代在核物理中获得大发展，出现了原子核集体运动的互作用玻色子模型 (IBM)[33] 。从 20 世纪 80 年代以来，动力学对称性理论又在原子、分子物理[34] 和量子光学[35,36] 中获得成功应用，近年来又用于非自治量子系统。

动力学对称性理论，是在群论和李代数的范围内研究量子系统的守恒律和相应的动力学对称性，即在李代数范围内研究量子系统的可积性问题。它的进一步发

展则是在非线性李代数 (包络代数) 的范围内研究量子系统的可积性，即所谓的量子群和量子代数[37−39]。

动力学对称性理论原来的研究对象是自治的量子系统，即 Hamilton 量不依赖于时间但具有代数结构的量子系统，研究这类系统的定态 (静态) 动力学对称性、守恒律及可积性问题。然而许多非自治量子系统也具有代数结构，要研究其守恒律、动力学对称性以及可积性问题，就必须把动力学对称性理论加以改造和推广。代数动力学正是在这种需要的激励下发展起来的。

代数动力学把动力学对称性理论与非自治系统量子力学完美地结合起来，把原子核物理学中的自治系统的定态动力学对称性理论推广到人造量子系统中的非自治系统的时间有关的动力学对称性理论。代数动力学把时间之矢放入静态的运动学代数之中，使之按动力学规律随时间演化。它用代数和群论方的方法去揭示系统的守恒律和与之相应的对称性，使非自治量子系统的求解变得容易，并突出解的物理内容，即守恒量子数和动力学对称性。总之，代数动力学强调动力学的代数结构和代数系统的动力学演化。

## 14.2　量子对称运动模式与代数动力学

### 14.2.1　动力学的诸要素

为了理解代数动力学的内涵和它与经典力学和量子力学的关系，有必要从动力学的诸要素对代数动力学加以剖析，并把它与经典力学和量子力学做个比较。表 14-2 正是为了实现这种剖析与比较。

**表 14-2　动力学诸要素的比较**

| 动力学诸要素 | 通常的动力学 | | 代数动力学 | |
|---|---|---|---|---|
| | 经典的 | 量子的 | 经典的 | 量子的 |
| (1) 运动之舞台：时空 | $X=(r,t)$ | | $X=(r,t)$ | |
| (2) 运动之描述: 运动学 | 广义坐标与动量 | | 李代数生成元 | |
| a. 运动学变量: | $q_i, p_i$, | $\hat{q}_i, \hat{p}_i$ | $x_i(q,p)$, | $\hat{x}_i(\hat{q},\hat{p})$ |
| b. 运动学代数: | $\{q_i, p_i\}=\delta_{ij}$, | $[\hat{q}_i, \hat{p}_i]=\mathrm{i}\hbar\delta_{ij}$ | $\{x_i, x_j\}=c_{ij}^k x_k$, | $[\hat{x}_i, \hat{x}_j]=\mathrm{i}c_{ij}^k \hat{x}_k$ |
| (3) 运动之定律 | | | | |
| a. 惯性律: 质量<br>$a+b\mapsto$Hamilton 量 | $\left.\begin{matrix} m \\ v(q) \end{matrix}\right\\} H(q,p)$, | $\hat{H}(\hat{q},\hat{p})$ | $H(x_i,\alpha(t))$, | $\hat{H}(\hat{x_i},\alpha(t))$ |
| b. 力律：势<br>c. 守恒律: 能量守恒之微分形式 | $\dot{q}_i=\{q_i,H\}$,<br>$\dot{p}_i=\{p_i,H\}$, | $\dfrac{\mathrm{d}\hat{q}_i}{\mathrm{d}t}=\dfrac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{q}_i,\hat{H}]$<br>$\dfrac{\mathrm{d}\hat{p}_i}{\mathrm{d}t}=\dfrac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{p}_i,\hat{H}]$ | $\dot{x}_i=\{x_i,H\}$, | $\dfrac{d\hat{x}_i}{\mathrm{d}t}=\dfrac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{x}_i,\hat{H}]$ |

从表 14-2 可知：①代数动力学是把通常的动力学从泊松–Heisenberg 代数动力

学形式推广到一般李代数动力学[28,29] 形式。这是因为，通常的经典动力学的运动学代数为泊松代数[40]，通常的量子力学的运动学代数为 Heisenberg 代数[41]，而代数动力学的运动学代数则为一般的李代数。②在通常的动力学中，把 Hamilton 量区分为动能与势能两部分是重要的，代数动力学则不强调这种划分，而强调 Hamilton 量的代数结构。

### 14.2.2　代数动力学及其内涵

1. 量子运动学代数

见表 14-2，运动学代数是动力学的基本要素，它有两方面的内涵：①规定运动学变量；②确定这些变量之间的代数关系。同时，运动学代数规定了动力系统运动的内涵，即什么东西在运动，它们的相互关系如何。运动学代数规定了运动的模式或类型，正是在这一点上把动力学系统区分为不同的代数动力学：不同运动模式的代数动力学。

运动学代数规定了各种可能的运动模式以及如何描述这些运动模式。对于经典力学，是粒子的共轭的正则坐标与正则动量在运动，它们之间满足泊松代数关系。对量子力学，运动模式的描述更加广义一些，可以叙述如下：量子运动模式用可互易算子集 $\hat{H}_v$ 和它们的本征值 $n_v$ 描述。这些运动模式的激发、退激发和相互转化，用升算子 $\hat{E}_\alpha$、降算子 $\hat{E}_{-\alpha}$ 及其乘积描述。所有可能的量子运动模式，它们的激发和退激发组成量子运动学算子集$\{\hat{H}_v,\hat{E}_\alpha,\hat{E}_{-\alpha}\}$，它们的集合及其扩充在李代数对易子运算之下构成一个封闭的代数，称为量子运动学代数。

对于坐标空间的量子力学，基本的运动学代数，对一维而言是一维 Heisenberg 代数 $h(3)(\hbar=1)$:

$$h(3)=\{\hat{q},\hat{p},1\mid[\hat{q},\hat{p}]=i\} \tag{14-1}$$

对 $f$ 维而言是 $f$ 维 Heisenberg 代数 $h(3)$ 的直和 $\sum\limits_{i=1}^{f}h_i(3)$。应当指出，基本运动学代数描述一切可能的运动模式，生成整个 Hilbert 空间。而复合的运动学代数

$$g=\{\hat{x}_i(\hat{q},\hat{p})\,|[\hat{x}_i,\hat{x}_j]=\mathrm{i}c_{ij}^k\hat{x}_k\} \tag{14-2}$$

常生成一个子空间，描述某种特殊类型的运动模式。对于一维情况，最简单的复合代数是

$$\mathrm{su}(1,1)=\left\{\hat{k}_+=\frac{\hat{p}^2}{2},k_-=\frac{\hat{q}^2}{2},\hat{k}_0=-\frac{\mathrm{i}}{4}(\hat{q}\hat{p}+\hat{p}\hat{q})\right\} \tag{14-3}$$

对 $f$ 维，二次型的复合代数是

$$\mathrm{sp}(2f)=\left\{\hat{q}_i\hat{q}_j,\hat{p}_i\hat{p}_j,\frac{1}{2}(\hat{q}_i\hat{p}_j+\hat{p}_j\hat{q}_i)\right\} \tag{14-4}$$

显然，无论代数 (14-3) 或代数 (14-4)，只能生成 Hilbert 空间的一个子空间。

2. 代数动力学的定义

定义了运动学代数之后，应当转向动力学。运动学代数是静态的代数，它刻画了各种可能的运动模式，并未描述这些运动学变量如何随时间演化。运动学代数随时间的演化，是代数动力学的基本内容。为了使静态的运动学代数随时间演化，我们需要一个时间平移算子。而运动学要变成动力学，则需要一个 Hamilton 量。能量守恒定律要求时间平移算子应当是系统的 Hamilton 量 (差一个量纲常数)。对于代数动力学，系统的 Hamilton 量必须是运动学变量, 即运动学代数生成元的函数 $\hat{H}=\hat{H}(\hat{x}_i,\alpha(t))$。有了 Hamilton 量之后，代数动力学定义为

$$\left\{\frac{\mathrm{d}\hat{x}_i}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}}[\hat{x}_i,\hat{H}]\,\middle|\,[\hat{x}_i,\hat{x}_j]=\mathrm{i}c_{ij}^k\hat{x}_k,\hat{H}=\hat{H}(\hat{x}_i,\alpha(t))\right\} \tag{14-5}$$

式 (14-5) 表明，代数动力学就是系统的 Hamilton 量驱动的随时间演化的运动学代数。应当指出，运动学代数只描述运动的可能模式，它比较普遍，适用的范围比较宽。而代数动力学则描述某种特定运动模式的实现，它由 Hamilton 量的结构决定，比较具体与特殊。对同一种运动学代数，由于系统不同，所以相应的 Hamilton 量结构不同，动力学也就不同。

代数动力学的基本概念和数学物理内容可以小结如下。真空背景和相互作用的对称性使量子运动具有对称模式, 使量子系统的 Hamilton 量具有代数结构。量子对称运动模式的定态用互易的量子数算符描述、非定态用量子跃迁算符描述。二者构成如下的李代数结构: 量子对称运动模式的定态及其量子数用卡当算子的本征矢和本征值描述；量子对称运动模式的非定态量子跃迁 (激发和退激发) 用升、降算子描述。如振动模式的代数结构：$b^+b$, $b^+$, $b$; 角动量模式的代数结构：$J_0$,$J_+$, $J_-$; 一般对称运动模式的代数结构：$H_i$,$E_{+\alpha}$,$E_{-\alpha}$。

代数动力学的物理基础：量子运动的能量标度的阶梯等级性 (巨大的能标差距)，使系统低能运动模式的卡当算子、升算子和降算子形成一个近似的闭合代数 (运动学代数)，使系统的等效 Hamilton 量具有动力学代数结构，这是量子动力学对称性的层展性 (emergence of quantum dynamical symmetry)。进而使系统的运动学代数生成元随时间演化成为代数动力学系统。量子运动能量标度的阶梯等级性是对称性算子形成闭合代数并成为代数动力学的物理基础。

代数动力学是通常的 Heisenberg 量子力学的推广, 是核结构研究中的代数–群论方法和动力学对称性理论的发展。通常的 “Heisenberg 代数动力学” 形式为

(1) 其运动学变量是广义坐标和动量，服从 Heisenberg 代数：$[\hat{q}_i,\hat{p}_j]=\mathrm{i}\hbar\delta_{ij}$；

(2) 其时间演化算子 ——Hamilton 量是 Heisenberg 代数的函数:$H(\hat{q},\hat{p})$；

(3) 其代数生成元的动力学是 Heisenberg 方程:$\mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}\hat{q}_i}{\mathrm{d}t}=[\hat{q}_i,H(\hat{q},\hat{p})]$,　$\mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}\hat{p}_i}{\mathrm{d}t}=[\hat{p}_i,H(\hat{q},\hat{p})]$。

代数动力学把量子力学从通常的 “Heisenberg 代数动力学” 形式推广为一般的 “李代数动力学” 形式, 即为

(1) 其运动学变量是李代数生成元，服从一般李代数: $[\hat{X}_i,\hat{X}_j]=\mathrm{i}C_{ij}^k\hat{X}_k$；

(2) 其时间演化算子 ——Hamilton 量是李代数生成元的函数: $H(\hat{X}_i)$；

(3) 其李代数生成元的动力学是 Heisenberg 方程: $\mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}\hat{X}_i}{\mathrm{d}t}=[\hat{X}_i,H(\hat{X}_i)]$。

3. 时间有关的动力学对称性

为了理解非自治系统的时间有关的动力学对称性，需要介绍一些预备知识。

运动学群：群 $G$ 称为运动学群，如果它的生成元描述某种量子对称运动模式, 是量子系统的运动学代数。

考虑李群 $G$，其阶为 $n$，秩为 $l$，相应的李代数为[42]

$$g=\{\hat{x}_i,i=1,2,\cdots,n\}=\left\{\hat{H}_v,\hat{E}_{\pm\alpha}\middle|\nu=1,2,\cdots,l,\alpha=1,2,\cdots,\frac{n-l}{2}\right\} \tag{14-6}$$

考虑群 $G$ 的一个群链 (如正则群链) 及其相应的 Casimir 算子:

$$G\supset\ G_{s_1}\supset\ G_{s_2}\supset\ \cdots\cdots \tag{14-7}$$

$$\hat{C}_r\ \ \hat{C}_{s_1}\ \ \hat{C}_{s_2}\ \ \cdots\cdots\ \ \hat{H}_v \tag{14-8}$$

从一个群链，可以构造一组第二类完备算子集 (CSCOII)[43]：

$$\text{CSCOII}=\left\{\hat{C}_r,\hat{C}_s,\hat{H}_v\right\} \tag{14-9}$$

从群论知道，CSCOII 的共同本征函数组成了该群的不可约表示空间的基矢，而所有不可约表示空间的总和仿射了整个 Hilbert 空间。

**例 1**　SU(2) 群：$\mathrm{su}(2)=\{J_0,J_+,J_-\},n=3,l=1$。

群链是 $\mathrm{SU}(2)\supset U(1)$，$\text{CSCOII}=\left\{\hat{J}^2,\hat{J}_0\right\}$，它们的共同本征函数 $\{Y_{jm}\}$ 是 $j$ 标志的不可约表示空间的基矢, 所有 $j$ 标志的不可约表示空间的总和仿射整个 SU(2) 群的 Hilbert 空间。

**例 2**　SU(3) 群：$\mathrm{su}(3)=\left\{\hat{Y},\hat{T}_3,\hat{E}_{\pm\alpha}\,|\alpha=1,2,3\right\}$, $n=8,l=2$。

从群链 $\mathrm{SU}(3)\supset U(2)\supset\mathrm{SU}(2)\supset U(1)$ 可以得 $\text{CSCOII}=\left\{\hat{C}_3,\hat{C}_2,\hat{Y},\hat{T}^2,\hat{T}_3\right\}$, 它们的共同本征函数 $\{Y_{\lambda_v YTT_3}\}$ 的不可约表示的全体仿射了整个 SU(3) 群的 Hilbert 空间。

动力学群: 一个运动学群成为动力学群，如果它的运动学代数是一个 Hamilton 系统的动力学变量，即 $\hat{H}$ 是 $\{\hat{x}_i\}$ 的函数 $\hat{H}=\hat{H}(\hat{x}_i,\alpha(t))$。

定态动力学对称性 [44]: 一个系统具有定态动力学对称性，如果它的 Hamilton 量是动力学群的 CSCOII 的函数，即

$$\hat{H}(\hat{x}_i, \alpha(t)) = \hat{H}(\hat{C}_r, \hat{C}_s, \hat{H}_v, \alpha(t)) \tag{14-10}$$

应当指出，一个系统具有动力学群，只表明 Hamilton 量是其运动学变量 $\{\hat{x}_i\}$ 的函数 $\hat{H} = (\hat{x}_i, \alpha(t))$。一个系统具有定态动力学对称性，则对系统的 Hamilton 量 $\hat{H}$ 的结构有更严格的限制，$\hat{H}$ 必须通过 CSCOII 依赖于 $\{\hat{x}_i\}$。正是因为如此，具有定态动力学对称性的量子系统是具有守恒量子数完备集的可积系统，而具有动力学群，不具有定态动力学对称性的系统 (一般为非线性系统) 则一般不具有守恒量子数完备集，因而一般不是完全可积的。

时间有关的动力学对称性：一个非自治量子系统具有时间有关的动力学对称性，如果

(1) 存在一组时间有关的第二类完备算子集 CSCOII=$\left\{\hat{C}_r, \hat{O}_s(t), \hat{I}_v(t)\right\}$，满足 $(\hbar = 1)$

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} \hat{C}_r \\ \hat{O}_s(t) \\ \hat{I}_v(t) \end{pmatrix} + \mathrm{i}\left[\hat{H}(\hat{x}_i, \alpha(t)), \begin{pmatrix} \hat{C}_r \\ \hat{O}_s(t) \\ \hat{I}_v(t) \end{pmatrix}\right] = 0 \tag{14-11}$$

(2) 存在一个规范变换 $\hat{U}_g(\hat{x}_i, t)$，使得

$$\hat{\bar{C}}_r = U_g^{-1}\hat{C}_r U_g = \hat{C}_r \tag{14-12}$$

$$\hat{\bar{O}}_s = U_g^{-1}\hat{O}_s U_g \tag{14-13}$$

$$\hat{\bar{I}}_v = U_g^{-1}\hat{I}_v U_g \tag{14-14}$$

$$\hat{\bar{H}} = U_g^{-1}\hat{H}U_g - \mathrm{i}U_g^{-1}\frac{\partial}{\partial t}U_g = \hat{\bar{H}}(\hat{C}_r, \hat{\bar{O}}_s, \hat{\bar{I}}_v; \alpha(t)) \tag{14-15}$$

显然，在规范变换 (14-12)~ 变换 (14-15) 下，方程 (14-11) 是协变的，即

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} \hat{C}_r \\ \hat{\bar{O}}_s(t) \\ \hat{\bar{I}}_v(t) \end{pmatrix} + \mathrm{i}\left[\hat{\bar{H}}(\hat{C}_r, \hat{\bar{O}}_s, \hat{\bar{I}}_v; \alpha(t)), \begin{pmatrix} \hat{C}_r \\ \hat{\bar{O}}_s \\ \hat{\bar{I}}_v \end{pmatrix}\right] = 0 \tag{14-16}$$

从式 (14-15) 和式 (14-16) 可知，

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} \hat{C}_r \\ \hat{\bar{O}}_s(t) \\ \hat{\bar{I}}_v(t) \end{pmatrix} = 0 \tag{14-17}$$

即变换后的 CSCOII 不显含时间。具有性质 (14-15) 或性质 (14-17) 的规范变换称为最佳规范变换。式 (14-15) 表明，时间有关的动力学对称性在最佳规范变换下成为定态动力学对称性。因此，时间有关的动力学对称性对非自治量子系统的 Hamilton 量的结构作出了更加严格的限制。

4. 动力学非绝热基矢

时间有关的 CSCOII 的共同本征函数 $\varphi_{n_r n_s n_v}(t)$ 满足

$$\begin{pmatrix} \hat{C}_r \\ \hat{O}_s(t) \\ \hat{I}_v(t) \end{pmatrix} \varphi_{n_r n_s n_v}(t) = \begin{pmatrix} n_r \\ n_s \\ n_v \end{pmatrix} \varphi_{n_r n_s n_v}(t) \tag{14-18}$$

它乘以相位因子后，得

$$\Psi_{n_r n_s n_v}(t) = \exp[\mathrm{i}\theta_{n_r n_s n_v}(t)]\varphi_{n_r n_s n_v}(t) \tag{14-19}$$

构成了动力学非绝热基矢[45]。“动力学” 表明该基矢包含动力学信息，不是人为任意选取的表象的基矢，而是随动力学过程演化的活动标架，就像微分几何中随几何体变动的活动标架一样。“非绝热” 一词表示该基矢是在完全的动力学演化中生成的，不是在绝热过程 (近似) 中生成的。非绝热基矢这一名称在核物理中使用过，用以描述时间有关的壳模型基矢的非绝热特征。式 (14-19) 中的相位定义为

$$\theta_{n_r n_s n_v}(t) = \int_0^t \left\langle \varphi_{n_r n_s n_v}(\tau) \left| \mathrm{i}\frac{\partial}{\partial \tau} - \hat{H}(\tau) \right| \varphi_{n_r n_s n_v}(\tau) \right\rangle \mathrm{d}\tau \tag{14-20}$$

它包含贝利相位[46−49] 和动力学相位，称为总相位。不难证明，动力学非绝热基矢 $\Psi_{n_r n_s n_v}$ 满足时间有关的 Schroedinger 方程

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\Psi(t) = \hat{H}(t)\Psi \tag{14-21}$$

因此，它包含了系统的动力学信息。由于这种基矢是随着动力学演化而运动的活动标架 (而非固定标架)，用它们作表象基矢就显得特别方便和具有优越性。Schroedinger 方程 (14-21) 的一般解可按动力学非绝热基矢展开

$$\Psi(t) = \sum C_{n_r n_s n_v}(0)\,\Psi_{n_r n_s n_v}(t) \tag{14-22}$$

其展开式系数 $C_{n_r n_s n_v}(0)$ 不随时间变化而完全由初始条件决定。这再一次表明全部动力学信息已包含在动力学非绝热基矢 $\Psi_{n_r n_s n_v}(t)$ 之中。因此，$\Psi_{n_r n_s n_v}(t)$ 十分类似于自洽系统 $\hat{H}$ 的本征矢 (乘以时间因子)，是自洽系统动力学基矢 ($\hat{H}$ 的本征函数) 的自然推广 (但是它们不是 $\hat{H}(t)$ 的本征函数, 而是时间有关的 Schroedinger 方程的解)。

非绝热能级定义为

$$E_{n_r n_s n_v}(t) = \left\langle \Psi_{n_r n_s n_v}(t) \left| \hat{H}(t) \right| \Psi_{n_r n_s n_v}(t) \right\rangle \tag{14-23}$$

在一定条件下它们会出现能级交叉[45]。CSCOII 的平均值

$$\left\langle \Psi(t) \left| \hat{C}_r \right| \Psi(t) \right\rangle = \sum_{n_r n_s n_v} \left| C_{n_r n_s n_v}(0) \right|^2 n_r \tag{14-24}$$

$$\left\langle \Psi(t) \left| \hat{O}_r \right| \Psi(t) \right\rangle = \sum_{n_r n_s n_v} \left| C_{n_r n_s n_v}(0) \right|^2 n_s \tag{14-25}$$

$$\left\langle \Psi(t) \left| \hat{I}_r \right| \Psi(t) \right\rangle = \sum_{n_r n_s n_v} \left| C_{n_r n_s n_v}(0) \right|^2 n_v \tag{14-26}$$

显然是运动常数。

5. 规范协变性与规范自由度

由于 $\hat{H}(t)$ 显含时间，系统与外界有能量交换，系统的能量不再守恒，而且是不确定的。对于这样的非自治量子系统，存在着规范变换和规范协变性，

$$\begin{pmatrix} \Psi(t) \\ \hat{H}(t) \\ \hat{C}_r \\ \hat{O}_s(t) \\ \hat{I}_v(t) \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} \bar{\Psi}(t) = U_g^{-1}\Psi(t) \\ \hat{\bar{H}}(t) = U_g^{-1}\hat{H}(t)U_g - \mathrm{i}U_g^{-1}\dfrac{\partial U_g}{\partial t} \\ \hat{\bar{C}}_r = U_g^{-1}\hat{C}_r U_g = \hat{C}_r \\ \hat{\bar{O}}_s = U_g^{-1}\hat{O}_s U_g \\ \hat{\bar{I}}_v = U_g^{-1}\hat{I}_v U_g \end{pmatrix} \tag{14-27}$$

$$\mathrm{i}\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi \to \mathrm{i}\frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial t} = \hat{\bar{H}}\Psi \tag{14-28}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} \hat{C}_r \\ \hat{O}_s \\ \hat{I}_v \end{pmatrix} + \mathrm{i}\left[\hat{H}, \begin{pmatrix} \hat{C}_r \\ \hat{O}_s \\ \hat{I}_v \end{pmatrix}\right] = 0 \to \frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} \hat{C}_r \\ \hat{\bar{O}}_s \\ \hat{\bar{I}}_v \end{pmatrix} + \mathrm{i}\left[\hat{\bar{H}}, \begin{pmatrix} \hat{C}_r \\ \hat{\bar{O}}_s \\ \hat{\bar{I}}_v \end{pmatrix}\right] = 0 \tag{14-29}$$

上述规范协变性，导致选择规范变换的自由度和物理量平均值对规范变换的不变性。这一性质允许选择物理上有意义的、方便的规范去求解动力学问题，与规范场论中的规范变换在形式上相似，但物理内涵有所不同。在规范场论[50] 中，规范不变性除了预示非物理自由度外，还包含了物理上真实的规范场，规范不变性规定了物质场与规范场相互作用的形式，因而是一个物理原理。在代数动力学中，只在时间变量上对物质场及其算子引进了规范变换，并没有引进规范场，因而规范不变性和规范选取的自由度更具有表象变换下运动方程的协变性和选择表象自由的意味。然而，代数动力学的框架允许引进规范场，$\hat{H}$ 随参数 $\alpha(t)$ 的变化的确可以在形式上诱导出一个规范场，代数动力学中的贝利相位就是与这种规范场的曲率有关，或者与 Hilbert 空间的参数底空间的弯曲有关。

6. 线性系统和量子–经典对应

线性系统及其定理：一个动力系统称为线性的，如果它的 Hamilton 量是动力学代数生成元的线性函数，即

$$\hat{H}(\hat{x}_i, t) = \sum_i h_i(t)\hat{x}_i \tag{14-30}$$

对于线性系统，存在下述**定理**：每个具有半单李代数的线性非自治量子系统都具有时间有关的动力学对称性。

实际经验 (例子) 表明，上述定理对于一般李代数也成立。

量子–经典对应：对于线性系统，可以建立漂亮的量子–经典对应。线性系统的不变算子可以表示为

$$I_v(\hat{x}_i, t) = \sum_i \alpha_i^v(t)\hat{x}_i, v = 1, 2, \cdots, l \tag{14-31}$$

从不变算子的运动方程

$$\frac{\partial \hat{I}_v}{\partial t} + \mathrm{i}[\hat{H}, \hat{I}_v] = 0 \tag{14-32}$$

可得系数 $\alpha_i^v$ 的运动方程为

$$\dot{\alpha}_i^v - \sum_{jk} h_j(t) C_{jk}^i \alpha_k^v = 0 \tag{14-33}$$

考虑相应的经典代数动力学方程

$$\left\{\frac{\mathrm{d}x_i(q,p)}{\mathrm{d}t} = \{x_i(q,p), H(x_i(q,p),t)\} \middle| \{x_i, x_j\} = C_{ij}^k x_k, H = \Sigma h_k(t) x_k\right\} \tag{14-34}$$

具体写出为

$$\dot{x}_i + \sum_{jk} h_j(t) C_{ji}^k x_k = 0 \tag{14-35}$$

在经典代数动力学方程中，生成元 $x_i(q,p)$ 是经典坐标 $\{q,p\}$ 的函数，量子对易子 [ ] 用泊松括号 {} 代替。再考虑式 (14-34) 和式 (14-35) 的复共轭经典代数动力学方程为

$$\left\{\frac{\mathrm{d}x_i^*}{\mathrm{d}t} = \{x_i^*, H^*\} \mid \{x_i^*, x_j^*\} = -C_{ik}^j x_k^*; H^* = \sum_k h_k(t) x_k^*\right\} \tag{14-36}$$

具体写出为

$$\dot{x}_i^* - \sum_{jk} h_j(t) C_{jk}^i x_k^* = 0 \tag{14-37}$$

其解为 $x_i^{*v}(t)$。

比较式 (14-33) 与式 (14-37)，有下述量子–经典对应

$$\alpha_i^v(t) = x_i^{*v}(t) \tag{14-38}$$

$$\hat{I}_v(t) = \sum_i x_i^{*v}(t)\hat{x}_i = \langle x^v | \hat{x} \rangle \tag{14-39}$$

即不变算子 $\hat{I}_v$ 的解，是经典解矢量 $x^v$ 与生成元矢量 $\hat{x}$ 的内积。通过计算经典动力学解，可以构造出量子力学解 $\hat{I}_v$，这与通常 $\hbar \to 0$ 的量子–经典对应不同。在 14.3 代数动力学的应用中，将给出几个量子–经典对应的具体例子。

# 14.3 代数动力学的应用: 人造量子系统的理论研究

## 14.3.1 可积系统与规则运动

先研究具有规则运动的量子系统，这类系统具有好量子数完备集，因而是可积系统。下面分两种情况研究，线性系统和非线性可积系统。

1. 线性系统

1) 粒子在 Paul 阱中的量子运动和广义的时间有关的谐振子 ——su(1,1) 线性代数动力系统

粒子在一维 Paul 阱中的量子运动可以用具有 su(1,1) 运动学代数[15] 的时间有关的谐振子来描述，其 Hamilton 量为

$$\hat{H}(t) = \frac{1}{2}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}k(t)\hat{q}^2 = \hat{k}_+ + k(t)\hat{k}_- \tag{14-40}$$

其中，su(1,1) 代数定义为

$$\hat{k}_+ = \frac{\hat{p}^2}{2}, \hat{k}_0 = -\frac{\mathrm{i}}{4}(\hat{p}\hat{q} + \hat{q}\hat{p}), \hat{k}_- = \frac{\hat{q}^2}{2} \tag{14-41}$$

$$[\hat{k}_+, \hat{k}_-] = 2\hat{k}_0, [\hat{k}_0, \hat{k}_\pm] = \pm\hat{k}_\pm \tag{14-42}$$

把式 (14-40) 推广到最一般的 su(1,1) 线性系统[14,15]

$$\hat{H}(t) = Z(t)\hat{k}_+ + \mathrm{i}Y(t)\hat{k}_0 + X(t)\hat{k}_- \tag{14-43}$$

该系统称为时间有关的广义谐振子，具有一定的典型性，成为许多物理学家研究的对象[7−14]。Hamilton 量 (14-43) 是 Hermite 的，但却不是时间反演不变的。Schroedinger 方程

$$\mathrm{i}\frac{\partial \varPsi(t)}{\partial t} = \hat{H}(t)\varPsi(t) \tag{14-44}$$

的解可用代数动力学方法求出。设规范变换为

$$U_g(t) = \exp[\mathrm{i}v_-(t)\hat{k}_-]\exp[v_0(t)\hat{k}_0] \tag{14-45}$$

在最佳规范条件下，

$$2v_-Z(t) + Y(t) - \dot{v}_0 = 0 \tag{14-46a}$$

$$\frac{\exp[2v_0]}{Z(t)}[v_-^2 Z(t) + v_-Y(t) + X(t) + \dot{v}_-] = \kappa \tag{14-46b}$$

规范变换后的 Schroedinger 方程变为

$$\mathrm{i}\frac{\partial \bar{\varPsi}}{\partial t} = \hat{\bar{H}}(t)\bar{\varPsi} \tag{14-47a}$$

$$\bar{\varPsi}(t) = U_g^{-1}\varPsi(t) \tag{14-47b}$$

$$\hat{\hat{H}}(t)=U_g^{-1}\hat{H}(t)U_g-\mathrm{i}U_g^{-1}\frac{\partial U_g}{\partial t}=f(t)\hat{I}(0) \tag{14-47c}$$

$$\hat{I}(0)=\hat{k}_++\kappa\hat{k}_-=\frac{1}{2}\hat{p}^2+\frac{1}{2}\kappa\hat{q}^2 \tag{14-47d}$$

$$f(t)=Z(t)\exp[-v_0(t)] \tag{14-47e}$$

容易求得式 (14-47a) 的解

$$\bar{\psi}_n(t)=N_n(\alpha)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_n(t)}\mathrm{e}^{-(\alpha q)^2/2}H_n(\alpha q) \tag{14-48a}$$

其中，$N_n(\alpha)=[\alpha/\sqrt{\pi 2^n}n!]^{\frac{1}{2}},\alpha^2=\omega_0=\sqrt{\kappa}$, $H_n(\alpha q)$ 为 $n$ 阶厄米多项式，$\theta_n(t)=-\left(n+\frac{1}{2}\right)\omega_0\int_0^t f(\tau)\mathrm{d}\tau$。动力学非绝热基矢，即方程 (14-44) 的严格解为

$$\varPsi_n(t)=U_g\bar{\psi}_n(t)=N_n(\chi\alpha)\exp\left[\mathrm{i}\theta_n(t)+\mathrm{i}\frac{v_-}{2}q^2\right]\exp[-(\chi\alpha q)^2/2]H_n(\chi\alpha q) \tag{14-48b}$$

其中，$\chi(t)=\exp[-v_0(t)/2]$, $v_0(t)$ 和 $v_-(t)$ 可由运动方程 (14-46) 求得 (或由下面的经典运动方程求得)。式 (14-48b) 描述一个尺度随时间变化的谐振子，但有一个与状态量子数 $n$ 无关的集体速度势 $\frac{v_-}{2}q^2$ 和一个总相位 $\theta_n(t)$。

非绝热能级

$$E_n(t)=\left\langle \varPsi_n\middle|\hat{H}(t)\,|\varPsi_n(t)\right\rangle=\frac{(\omega_0 f(t)-\dot{v}_-\mathrm{e}^{v_0(t)})}{2\alpha}\left(n+\frac{1}{2}\right) \tag{14-49}$$

贝利相位 (对周期为 $T$ 的 Hamilton 量)

$$\phi_B=-\left(n+\frac{1}{2}\right)\int_0^T\frac{v_-(t)\exp[v_0(t)]}{2\alpha^2}\mathrm{d}t \tag{14-50}$$

很容易求得不变 Cartan 算子

$$\hat{I}(t)=U_g\hat{I}(0)U_g^{-1}=\alpha_+\hat{k}_++\alpha_0\hat{k}_0+\alpha_-\hat{k}_- \tag{14-51a}$$

其中，

$$\alpha_+=\mathrm{e}^{v_0},\alpha_0=-2\mathrm{i}v_-\mathrm{e}^{v_0},\alpha_-=v_-^2\mathrm{e}^{v_0}+\kappa\mathrm{e}^{-v_0} \tag{14-51b}$$

它们满足的运动方程可从式 (14-11) 求得

$$\left.\begin{aligned}&\dot{\alpha}_+-Y(t)\alpha_+-\mathrm{i}Z(t)\alpha_0=0\\&\dot{\alpha}_0-2\mathrm{i}X(t)\alpha_++2\mathrm{i}Z(t)\alpha_-=0\\&\dot{\alpha}_-(t)+Y(t)\alpha_-+\mathrm{i}X(t)\alpha_0=0\end{aligned}\right\} \tag{14-51c}$$

与非线性运动方程 (14-46) 相比，方程 (14-51c) 实现了线性化。这是通过非线性变换 (14-51b) 达到的。

相应的经典运动方程

$$\frac{\mathrm{d}k_v(q,p)}{\mathrm{d}t}=\{k_v(q,p),H(k_v,t)\},(v=-,0,+) \tag{14-52}$$

具体写出为

$$\begin{aligned}&\frac{\mathrm{d}k_+}{\mathrm{d}t}+Y(t)k_++2\mathrm{i}X(t)k_0=0\\&\frac{\mathrm{d}k_0}{\mathrm{d}t}+\mathrm{i}Z(t)k_+-\mathrm{i}X(t)k_-=0\\&\frac{\mathrm{d}k_-}{\mathrm{d}t}-2\mathrm{i}Z(t)k_0-Y(t)k_-=0\end{aligned} \tag{14-53}$$

其中，$k_+=\frac{1}{2}p^2,k_0=-\frac{\mathrm{i}}{2}qp,k_-=\frac{1}{2}q^2$。

比较方程 (14-51c) 和方程 (14-53)，可得量子解与经典解之间的对应关系

$$\alpha_+=k_-,\alpha_0=2k_0,\alpha_-=k_+ \tag{14-54a}$$

$$\hat{I}(t)=k_-\hat{K}_++2k_0\hat{K}_0+k_+\hat{K}_- \tag{14-54b}$$

式 (14-54) 表明，量子解可以由经典解构成。在笛卡儿坐标系中，上述对应可写成更对称的形式，有兴趣的读者可参看文献 [15]。

从式 (14-53) 可得 $q$，$p$ 的运动方程

$$\begin{aligned}&\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}t}=Z(t)p+\frac{1}{2}Y(t)q\\&\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t}=-\frac{1}{2}Y(t)p-X(t)q\end{aligned} \tag{14-55}$$

设方程 (14-55) 的两组独立的解为 $(q_1,p_1)$ 和 $(q_2,p_2)$，引进复解

$$q=q_1+\mathrm{i}q_2,p=p_1+\mathrm{i}p_2 \tag{14-56}$$

不难验证

$$k_+=\frac{1}{2}pp^*,k_0=-\frac{\mathrm{i}}{4}(qp^*+q^*p),k_-=\frac{1}{2}qq^* \tag{14-57a}$$

$$v_0=\ln\alpha_+=\ln k_-,v_-=\frac{\mathrm{i}}{2}\frac{\alpha_0}{\alpha_+}=\mathrm{i}\frac{k_0}{k_-},k_+k_-+k_0^2=\kappa \tag{14-57b}$$

考虑初始条件的对应。对于量子解，设初条件为

$$v_0(0)=0,v_-(0)=0,U_g(0)=1 \tag{14-58a}$$

从式 (14-57a) 和式 (14-57b) 求得相应的经典解的初条件满足

$$\left.\begin{aligned}&k_-(0)=\frac{1}{2}q(0)q^*(0)=1\\&k_0(0)=-\frac{\mathrm{i}}{4}[q(0)p^*(0)+q^*(0)p(0)]=0\end{aligned}\right\} \tag{14-58b}$$

从式 (14-58b) 求得经典解的初值为

$$\left.\begin{aligned} q(0) &= \sqrt{2}(\cos\theta + \mathrm{i}\sin\theta) \\ p(0) &= \sqrt{2}\omega_0\left[\cos\left(\theta \pm \frac{1}{2}\right) + \mathrm{i}\sin\left(\theta \pm \frac{1}{2}\right)\right] \end{aligned}\right\} \tag{14-59}$$

其中，$\theta$ 是一连续取值的自由参数。初始值 (14-58a) 和初始值 (14-59) 表明，一组连续的经典轨道 $[q(t,\theta), p(t,\theta)]$ 对应于一个初条件为 $[v_0(0)=0, v_-(0)=0]$ 的量子解 $[v_0(t), v_-(t)]$，即无穷多个连成一片的经典轨道对应于一个量子运动。这是一个引人注目的结果。

上面以时间有关的广义谐振子对应的 su(1,1) 线性系统为例，详细阐明了运用代数动力学方法求解非自治系统量子力学问题的步骤，显示出这一理论方法的特点和优点。下面讨论一下上述解的应用价值。第一，对 Paul 阱中的粒子运动而言，一旦求得系统的严格解，就可以通过调节参数实现阱中粒子运动的控制 (如坐标或动量的控制)。第二，变频谐振子可以描述变频的激光，其严格解可以用于构造具有非经典性质的激光含时相干态。第三，谐振子是一切振动问题的零级近似，考虑环境影响之后，系统可能是非自治的。因此，含时广义谐振子的严格解可以用作非线性振动的很好的零级近似表象的基矢，它包含全部谐振动的动力学效应，叠加在它上面的非谐效应有可能当作微扰处理。

2) 加速器中粒子的极化、转动磁场中带自旋粒子的运动、激光在螺旋光纤中的偏振 ——su(2) 线性代数动力系统

加速器中的粒子相对于变化的磁场而运动，如何控制其极化[16]？带自旋粒子在转动磁场中运动，如何预测其自旋取向[21]？激光在螺旋光纤中传播时，如何计算其极化或偏振的变化 (贝利相位)[22]？如果假定中微子存在小的磁矩，在太阳强磁场中，中微子会转变成反中微子，如何计算反转几率？上述问题都可以变成非自治的 su(2) 线性系统问题，其 Hamilton 量可以写成[16]

$$\hat{H}(t) = \vec{X}(t)\cdot\hat{\vec{j}} = X_1(t)\hat{j}_1 + X_2(t)\hat{j}_2 + X_3(t)\hat{j}_3 \tag{14-60}$$

其中角动量算子 $\hat{j}_i$ 满足 su(2) 代表关系

$$[\hat{j}_i, \hat{j}_j] = \mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\hat{j}_k \tag{14-61}$$

时间有关的 Schroedinger 方程 (14-21) 可在下述规范变换下求解

$$U_g = \exp[\mathrm{i}v_3(t)\hat{j}_3]\exp[\mathrm{i}v_2(t)\hat{j}_2] \tag{14-62}$$

最佳规范的参数方程为

$$\left.\begin{aligned} &\frac{\mathrm{d}v_3}{\mathrm{d}t}\sin v_2 + X_1\cos v_2\cos v_3 - X_2\cos v_2\sin v_3 + X_3\sin v_2 = 0 \\ &\frac{\mathrm{d}v_2}{\mathrm{d}t} + X_1\sin v_3 + X_2\cos v_3 = 0 \end{aligned}\right\} \tag{14-63}$$

规范变换后的 Hamilton 量简化为

$$\hat{\hat{H}}(t) = f(t)\hat{I}(0) \tag{14-64a}$$

$$\hat{I}(0) = \hat{j}_3 \tag{14-64b}$$

$$f(t) = [X_2(t)\sin v_3 - X_1(t)\cos v_3]/\sin v_2 \tag{14-64c}$$

容易求得不变 Cartan 算子

$$\hat{I}(t) = U_g\hat{I}(0)U_g^{-1} = \alpha_1(t)\hat{j}_1 + \alpha_2(t)\hat{j}_2 + \alpha_3(l)\hat{j}_3 \tag{14-65a}$$

$$\alpha_1 = -\sin v_2 \cos v_3, \alpha_2 = \sin v_2 \sin v_3, \alpha_3 = \cos v_2 \tag{14-65b}$$

$\alpha_i$ 的运动方程可以从式 (14-11), 式 (14-60) 和式 (14-65a) 求得

$$\left.\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}\alpha_1}{\mathrm{d}t} + X_3\alpha_2 - X_2\alpha_3 = 0 \\ \frac{\mathrm{d}\alpha_2}{\mathrm{d}t} + X_1\alpha_3 - X_3\alpha_1 = 0 \\ \frac{\mathrm{d}\alpha_3}{\mathrm{d}t} + X_2\alpha_1 - X_1\alpha_2 = 0 \end{aligned}\right\} \tag{14-66}$$

与非线性方程 (14-63) 相比，运动方程 (14-66) 通过非线性变换 (14-65b) 实现了线性化。

从复共轭的经典代数动力学方程

$$\left\{\frac{\mathrm{d}j_i^*}{\mathrm{d}t} = \{j_i^*, H^*\} \middle| \{j_i^*, j_j^*\} = \varepsilon_{ijk}j_k^*, H^* = \sum_i X_i(t)j_i^*\right\} \tag{14-67a}$$

可求得 $j_i^*$ 的运动方程

$$\left.\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}j_i^*}{\mathrm{d}t} + X_3j_2^* - X_2j_3^* = 0 \\ \frac{\mathrm{d}j_2^*}{\mathrm{d}t} + X_1j_3^* - X_3j_1^* = 0 \\ \frac{\mathrm{d}j_3^*}{\mathrm{d}t} + X_2j_1^* - X_1j_2^* = 0 \end{aligned}\right\} \tag{14-67b}$$

比较运动方程 (14-66) 和运动方程 (14-67b)，可得量子解与经典解之间的对应关系

$$\hat{I}(t) = \left\langle \vec{j}(t) | \hat{\vec{j}} \right\rangle = \sum_i j_i^*(t)\hat{j}_i \tag{14-68}$$

按照代数动力学求解步骤，容易求得满足 Schroedinger 方程 (14-21) 的动力学非绝热基矢

$$\psi_{jm}(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_m(t)} \sum_{m'} D^j_{m'm}(0, -v_2, 0)\mathrm{e}^{\mathrm{i}m'v_3}|jm'\rangle \tag{14-69}$$

$$\theta_m(t) = m\int_0^\tau f(\tau)\mathrm{d}\tau \tag{14-70}$$

其中，$|jm\rangle$ 为 $\hat{j}^2, \hat{j}_3$ 的本征态，$D^j_{mn}$ 为 Wigner D-函数。

运用严格解 $\psi_{jm}(t)$ 可以计算粒子的极化，中微子的反转几率，激光在螺旋光纤中的贝利相位等物理量，有兴趣的读者可参看文献 [16]。

3) 时间有关的广义谐振子与外场的相互作用 ——su(1,1)⊕ $h(3)$ 线性代数动力系统[51]

前面用代数动力学方法处理的量子系统具有半单的李代数。按照 14.2 节关于线性半单李代数系统的一条定理，这样的非自治系统一定具有动力学对称性。前面用最佳规范变换具体找到了动力学不变算子，把规范变换后的 Hamilton 量变成了具有定态动力学对称性的形式 (即是 CSCOII 的函数)，因而从计算上证明了上述定理的正确性。本节的例子表明，那条定理对一般李代数也成立，代数动力学方法对一般的李代数系统也适用。

当把时间有关的广义谐振子置于外场中时，在线性耦合近似下，系统的 Hamilton 量可写成

$$\hat{H}(t) = X_+(t)\hat{k}_+ + \mathrm{i}X_0(t)\hat{k}_0 + X_-(t)\hat{k}_- + X_1(t)\hat{k}_1 + X_2(t)\hat{k}_2 + X(t) \tag{14-71}$$

这样的系统具有 su(1,1)⊕$h(3)$ 代数结构，其中

$$\mathrm{su}(1,1) = \left\{\hat{k}_+, \hat{k}_0, \hat{k}_-\right\} \tag{14-72a}$$

$\hat{k}_\alpha$ 的定义由式 (14-41) 给出，满足式 (14-42)。而 $\hat{k}_1 = \hat{p}$, $\hat{k}_2 = \hat{q}$ 与单位 1 构成 Heisenberg 代数

$$h(3) = \left\{\hat{k}_1, \hat{k}_2, 1\right\} \tag{14-72b}$$

补充的对易关系为

$$\left.\begin{aligned}
&[\hat{k}_1, \hat{k}_2] = -\mathrm{i}\\
&[\hat{k}_+, \hat{k}_1] = 0, [\hat{k}_0, \hat{k}_1] = \frac{1}{2}\hat{k}_1, [\hat{k}_-, \hat{k}_1] = \mathrm{i}\hat{k}_2\\
&[\hat{k}_+, \hat{k}_2] = -\mathrm{i}\hat{k}_1, [\hat{k}_0, \hat{k}_2] = -\frac{1}{2}\hat{k}_1, [\hat{k}_-, \hat{k}_2] = 0
\end{aligned}\right\} \tag{14-73}$$

由于 su(1,1) 是单纯的，而 $h(3)$ 是根 (Radical)，所以按定义该系统的代数结构具有一般李代数的形式：一般李代数 = 单纯李代数 ⊕ 根 = $S \oplus R$。

系统 (14-71) 除了描述时间有关的广义谐振子与外场的相互作用外[52−55]，还可用于讨论激光等离子体相互作用中的非泊松效应[56]。Schroedinger 方程 (14-21) 可以在下述规范变换下求解，

$$U_g(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}v(t)} \cdot \mathrm{e}^{\mathrm{i}v_2(t)\hat{k}_2} \cdot \mathrm{e}^{-\mathrm{i}v_1(t)\hat{k}_1} \cdot \mathrm{e}^{\mathrm{i}v_-(t)\hat{k}_-} \cdot \mathrm{e}^{\mathrm{i}v_0(t)\hat{k}_0} \tag{14-74}$$

规范变换参数 $v_i(t)$ 满足一组非线性常微分方程[51]，规范变换后的 Hamilton 量变为

$$\left.\begin{aligned}&\hat{\hat{H}}(t)=f(t)\hat{I}(0)\\&\hat{I}(0)=\hat{k}_++\kappa\hat{k}_-=\frac{1}{2}(\hat{p}^2+\kappa\hat{q}^2)\\&f(t)=X_+(t)\mathrm{e}^{-v_0(t)}\end{aligned}\right\}\tag{14-75}$$

由此容易求得系统的动力学非绝热基矢

$$\varPsi_n(t)=N_n(\chi\alpha)\mathrm{e}^{\mathrm{i}[\theta_n(t)+v(t)]}\mathrm{e}^{\mathrm{i}[\frac{1}{2}v_-(q-v_1)^2+v_2q]}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}[\chi\alpha(q-v_1)]^2}H_n(\chi\alpha(q-v_1))\tag{14-76}$$

其中，$\chi,\alpha,\theta_n,H_n$ 的意义与式 (14-48b) 一样。这里的 $\varPsi_n(t)$ 描述一个振动尺度和原点都随时间变化的振子。外场的耦合不仅改变了振子的原点，也改变了集体速度势 $\frac{1}{2}v_-(q-v_1)^2+v_2q$ 的形式。

从 $\varPsi_n(t)$ 可以计算非绝热能级 $E_n(t)$ 和贝利相位 $\phi_n^B$，这里从略。

为了讨论量子–经典对应，应算出 Cartan 不变算子

$$\hat{I}(t)=U_g\hat{I}(0)U_g^{-1}=\alpha_+\hat{k}_++\alpha_0\hat{k}_0+\alpha_0\hat{k}_0+\alpha_-\hat{k}_-+\alpha_1\hat{k}_1+\alpha_2\hat{k}_2+\delta\tag{14-77}$$

其中，$\alpha_i(t)$ 和 $\delta(t)$ 可用 $v_i(t)$ 非线性地表示出来。然而从式 (14-11) 求得 $\alpha_i(t)$ 和 $\delta(t)$ 的运动方程却是线性的，这再一次表现出代数动力学的优点是可以自动给出非线性变换，实现运动方程的线性化。

由于这里的代数结构不再是半单的，而不变算子的运动方程中涉及结构常数矩阵不能全部 Hermite 化，$\alpha_v(t)$ 与 $k_v(t)$ 之间失去了直接的对应。然而，存在着一种明确的间接的对应：$k_v(t)$ 的经典运动方程的无穷多个连续的齐次解对应于一个量子解中的 $\{\alpha_+(t),\alpha_0(t),\alpha_-(t)\}$，而 $k_v(t)$ 的经典运动方程的非齐次解对应于量子解中的 $\{\alpha_1(t),\alpha_2(t)\}$[51]。

4) 变频辐射场与经典流的相互作用 ——hw(4) 线性代数动力系统

变频辐射场与经典流[57] 的相互作用的 Hamilton 量为[58-60]

$$\hat{H}(t)=\omega(t)\hat{a}^+\hat{a}+\varOmega^*(t)\hat{a}^++\varOmega(t)\hat{a}\tag{14-78a}$$

它也可以描述变频振子与外电场的相互作用

$$\hat{H}(t)=\frac{1}{2}\omega(t)(\hat{p}^2+\hat{q}^2)+\mathrm{e}E(t)\hat{q}\tag{14-78b}$$

这是另一个具有一般李代数结构的系统，因为它具有 hw(4) 代数结构，而

$$\mathrm{hw}(4)=\{\hat{n}=\hat{a}^+\hat{a};\hat{a}^+,\hat{a},1\}=U(1)\oplus h(3)=S\oplus R\tag{14-79}$$

对易关系为

$$[\hat{a},\hat{a}^+]=1,[\hat{n},\hat{a}^+]=\hat{a}^+,[\hat{n},\hat{a}]=-\hat{a}\tag{14-80}$$

时间有关的 Schroedinger 方程 (14-21) 可以在两种规范 (两种表象) 中求解。先考虑谐振子表象，其规范变换使 Hamilton 量只剩下 $\hat{n}=a^+a$ 一项, 变换为

$$U_g(t) = \mathrm{e}^{v_1(t)\hat{a}} \cdot \mathrm{e}^{v_2\hat{a}^+} \cdot \mathrm{e}^{v_3(t)\hat{n}} \cdot \mathrm{e}^{v_4(t)} \tag{14-81}$$

$v_i$ 满足

$$\left.\begin{array}{l} v_3 = 0 \\ \dfrac{\mathrm{d}v_1}{\mathrm{d}t} - \mathrm{i}\omega(t)v_1 + \mathrm{i}\varOmega(t) = 0 \\ \dfrac{\mathrm{d}v_2}{\mathrm{d}t} + \mathrm{i}\omega(t)v_2 + \mathrm{i}\varOmega^*(t) = 0 \\ \dfrac{\mathrm{d}v_4}{\mathrm{d}t} + \dfrac{\mathrm{d}v_1}{\mathrm{d}t}v_2 + \mathrm{i}\varOmega(t)v_2 - \mathrm{i}\varOmega^*(t)v_1 - \mathrm{i}\omega(t)v_1v_2 = 0 \end{array}\right\} \tag{14-82}$$

在 $U_g(0) = 1$ 的初始条件下，很容易求得式 (14-82) 的解析解。

变换后的 Hamilton 量为

$$\hat{\bar{H}}(t) = \omega(t)\hat{I}(0) \tag{14-83a}$$

$$\hat{I}(0) = \hat{n} \tag{14-83b}$$

动力学不变算子

$$\hat{I}(t) = U_g\hat{I}(0)U_g^{-1} = \hat{n} + \alpha(t)\hat{a} + \alpha^*(t)\hat{a}^+ + \delta(t) \tag{14-84}$$

由于不变算子在 $\hat{n}$ 的子空间的自由度被冻结了，对 $\hat{I}(t)$ 而言，hw(4) 约化为 $h(3)$，导致很好的量子–经典对应。

动力学非绝热基矢为

$$\varPsi_n(t) = \sum_{m=0}^{\infty} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\int_0^t \omega(\tau)\mathrm{d}\tau + \mathrm{iRe}\int_0^t \gamma(\tau)\chi(\tau)\mathrm{d}\tau - \frac{1}{2}|\chi(t)|^2} \sqrt{\frac{n!}{m!}} |\chi(t)|^{m-n} L_n^{m-n}(|\chi(t)|^2)\ |m\rangle \tag{14-85a}$$

其中，$L_n^m(x)$ 为拉盖尔多项式，$|m\rangle$ 为谐振子波函数

$$\gamma(t) = \varOmega(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_0^t \omega(\tau)\mathrm{d}\tau} \tag{14-85b}$$

$$\chi(t) = -\mathrm{i}\int_0^t \gamma^*(\tau)\mathrm{d}\tau \tag{14-85c}$$

再考虑相干态表象，其规范变换使 Hamilton 量只剩下 $a$ 一项, 这时 $v_i$ 满足

$$\left.\begin{array}{l} v_1 = 0 \\ \dfrac{\mathrm{d}v_2}{\mathrm{d}t} + \mathrm{i}\omega(t)v_2 + \mathrm{i}\varOmega^*(t) = 0 \\ \dfrac{\mathrm{d}v_3}{\mathrm{d}t} + \mathrm{i}\omega(t) = 0 \\ \dfrac{\mathrm{d}v_4}{\mathrm{d}t} + \mathrm{i}\varOmega(t)v_2 = 0 \end{array}\right\} \tag{14-86}$$

初始条件 $U_g(0) = 1$ 的解很容易算出。这时

$$\hat{\bar{H}} = f(t)\hat{I}(0) \tag{14-87a}$$

$$\hat{I}(0) = \hat{a} \tag{14-87b}$$

$$f(t) = \gamma(t) \tag{14-87c}$$

满足时间有关的 Schroedinger 方程 (14-21) 的动力学非绝热基矢为含时相干态

$$\Psi_\lambda(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_\lambda(t)}\phi_\lambda(t) \tag{14-88a}$$

$$\phi_\lambda(t) = \mathrm{e}^{\frac{1}{2}\left[|\Lambda(t)|^2 - |\lambda|^2\right] - \mathrm{i}\int_0^t \gamma(\tau)\chi(\tau)\mathrm{d}\tau}|\Lambda(t)\rangle \tag{14-88b}$$

$$|\Lambda(t)\rangle = \mathrm{e}^{\Lambda(t)\hat{a}^+ - \Lambda^*(t)\hat{a}}\,|0\rangle = \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}|\Lambda(t)|^2}\sum_{n=0}^{a}\frac{|\Lambda(t)|^n}{\sqrt{n!}}\,|n\rangle \tag{14-88c}$$

$$\theta_\lambda(t) = -\lambda\chi^*(t) \tag{14-88d}$$

$$\Lambda(t) = v_2(t) + \lambda\mathrm{e}^{v_3(t)} = \frac{\gamma(t)}{\Omega(t)}(\lambda + \chi(t)) \tag{14-88e}$$

由于同样的理由 ($\hat{I}(t)$ 在 $\hat{n}$ 的子空间的分量被冻结了)，这种情况下，也有很好的量子–经典对应。

本实例演示了两种规范和两种表象 (谐振子表象和相干态表象)，具体显示了规范自由度，即表象选取自由度的含义。对于一个比较复杂的代数，由于 CSCOII 可以有不同选法，这就导致不同的最佳规范，导致求解问题时不同的表象。究竟选取哪个表象，视物理问题而定。如在本例中，如果问题的初始条件为相干态，则选用相干态表象最为恰当。

5) 时间有关的 Landau 系统及其扩充 ——sp(4)⊕$h$(3) 和 su(1,1)⊕$h$(3) 线性代数动力系统

带电粒子在均匀磁场中的量子运动是著名的 Landau 系统问题[23,25]。它的重要性在于与量子霍尔效应相联系。下面要研究的是 Landau 系统在两个方面的推广：①均匀磁场随时间变化；②除磁场外，粒子还受一个二次方电势的作用。其 Hamilton 量为

$$\hat{H}(t) = \frac{1}{2m}(\vec{p} - \mathrm{e}\vec{A})^2 + \mathrm{e}\phi(\vec{r}) \tag{14-89a}$$

$$\vec{A}(t) = B(t)(-y, 0, 0) \tag{14-89b}$$

$$\phi(t) = -E(t)y + k(t)y^2 \tag{14-89c}$$

考虑式 (14-89b) 和式 (14-89c) 后，式 (14-89a) 变为

$$\hat{H}(t) = \frac{\hat{p}_z^2}{2m} + \frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + 2\mathrm{e}B(t)\hat{y}\hat{p}_x + \mathrm{e}^2B^2(t)\hat{y}^2) - \mathrm{e}E(t)\hat{y} + \mathrm{e}k(t)\hat{y}^2 \tag{14-90}$$

考虑 $p_z$ 守恒后，式 (14-90) 具有 sp(4)⊕$h$(3) 代数结构，其中

$$\begin{aligned}&\mathrm{sp}(4) = \left\{\hat{p}_i\hat{p}_j, \hat{q}_i\hat{q}_j, \frac{1}{2}(\hat{p}_iq_j + \hat{q}_j\hat{p}_i)\,|i, j = x, y\right\}\\&h(3) = \{\hat{y}, \hat{p}_y, 1\}\end{aligned} \tag{14-91}$$

进一步考虑 $p_x$ 守恒后，约化为 su(1,1)$\oplus h(3)$ 结构，其中

$$\begin{aligned}&\mathrm{su}(1,1)=\left\{\hat{I}=\frac{1}{2}(\hat{p}_y\hat{y}+\hat{y}\hat{p}_y),\hat{E}_2=\hat{p}_y^2,\hat{E}_{-2}=\hat{y}^2\right\}\\&h(3)=\{\hat{I}_0=i,\hat{E}_1=\hat{p}_y,\hat{E}_{-1}=\hat{y}\}\end{aligned}\tag{14-92}$$

$\hat{H}$ 可改写成

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}_z^2+\hat{p}_x^2}{2m}+\frac{1}{2m}\hat{H}_y\tag{14-93a}$$

$$\hat{H}_y=\hat{E}_2+b_{-1}\hat{E}_{-1}+b_{-2}\hat{E}_{-2}\tag{14-93b}$$

$$b_{-1}=2\mathrm{e}B(t)p_x-2\mathrm{e}mE(t),b_{-2}=\mathrm{e}^2B^2(t)+2\mathrm{e}mk(t)\tag{14-93c}$$

时间有关的 Schroedinger 方程 (14-21) 可在下述规范变换下求解

$$U_g^{-1}(t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}f_0\hat{I}}\cdot\mathrm{e}^{\mathrm{i}f_{-2}\hat{E}_{-2}}\cdot\mathrm{e}^{\mathrm{i}f_1\hat{E}_1}\cdot\mathrm{e}^{\mathrm{i}f_{-1}\hat{E}_{-1}}\tag{14-94}$$

适当选取 $f_i$ 的运动方程后[25]

$$\hat{\bar{H}}_y=Z_2(t)(\hat{E}_2+\hat{E}_{-2})+Z(t)=Z_2(t)(\hat{p}_y^2+\hat{y}^2)+Z(t)\tag{14-95a}$$

$$Z_2(t)=\mathrm{e}^{-2f_0},Z(t)=\left(b_{-1}-2m\frac{\mathrm{d}f_{-1}}{\mathrm{d}t}\right)f_1+b_{-2}f_1^2+f_{-1}^2\tag{14-95b}$$

动力学非绝热基矢为

$$\varPsi_{p_zp_xn}(t)=\frac{1}{2\pi}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p_zz+p_xx)-\mathrm{i}\theta_{p_zp_xn}(t)-\mathrm{i}(f_{-1}y+f_{-2}(y-f_1)^2)}\mathrm{e}^{-\frac{f_0}{2}}\quad\varPhi_n(\mathrm{e}^{-f_0}(y-f_1))\tag{14-96a}$$

$$\theta_{p_zp_xn}(t)=\int_0^t\left[\frac{p_z^2+p_x^2}{2m}+\frac{Z_2(\tau)}{m}\left(n+\frac{1}{2}\right)+\frac{Z(\tau)}{2m}\right]\mathrm{d}\tau\tag{14-96b}$$

$\varPhi_n(x)$ 为通常的谐振子波函数。上式代表沿 $z$ 和 $x$ 方向为平面波，沿 $y$ 方向是振动, 尺度和原点随时间变化的谐振子。由于变化的电磁场，$y$ 方向的运动还获得一个与状态量子数无关的集体速度势 $f_{-1}y+f_{-2}(y-f_1)^2$。

完全的不变算子集为 $\{\hat{p}_z,\hat{p}_x,\hat{I}(t)=U_g(\hat{p}_y^2+\hat{y}^2)U_g^{-1}\},\hat{I}(t)$ 很容易算出是 su(1,1) $\oplus h(3)$ 代数元素的线性函数，非绝热能级和贝利相位也可以用 $\varPsi_{p_zp_xn}$ 计算见参考文献 [25]。

时间有关的 Landau 系统[25] 的意义在于用它可以研究电磁场随时间变化的量子霍尔效应。考虑粒子自旋以后的时间有关的 Landau 系统，将在可积的非线性系统中讨论。

6) 核子在变化的四极平均场中的运动 ——sp(6) 和 su(3) 线性代数动力系统

在核物理中，特别是在重离子核反应中，由于原子核内部激发或重离子碰撞，原子核的形状及相应的平均场会随时间发生变化[26]，核子感受到一个随时间变化的平均场，这时静态的壳模型应当代之以时间有关的壳模型[45]。

由核结构研究的经验知，核子感受到的最重要的变化的平均场是四极形变下的平均场[27]，其 Hamilton 量可写成

$$\begin{aligned}\hat{H}(t) &= \sum_{i,j=1}^{3}[A_{ij}(t)\hat{p}_i\hat{p}_j + B_{ij}(t)\hat{q}_i\hat{q}_j] \\ &= \sum_{ij=1}^{3}[C_{ij}(t)a_i^+a_j + D_{ij}a_i^+a_j^+ + D_{ij}^*a_ia_j]\end{aligned} \tag{14-97}$$

式 (14-97) 具有 sp(6) 代数结构

$$\mathrm{sp}(6) = \{a_i^+a_j^+, a_i^+a_j, a_ia_j, |i,j=1,2,3\} \tag{14-98}$$

其中，$a_i^+a_j^+(a_ia_j)$ 表示能量很高的双声子激发跃迁，在一定条件下 (只考虑低能核谱) 可以略去。这时 Hamilton 量近似为

$$\hat{H}(t) = \sum_{i,j=1}^{3} C_{ij}(t)a_i^+a_j \tag{14-99}$$

具有 su(3) 代数结构：$\mathrm{su}(3) = \{a_i^+a_j\,|i,j=1,2,3\}$。

非自治量系统式 (14-99) 已被求解，由于数学较繁，此处从略。这里要强调的是 su(3) 动力系统有两个动力学不变的 Cartan 算子，这是除 Landau 系统以外以前没有碰到过的。Landau 系统的不变量 $\hat{p}_z, \hat{p}_x$ 是显然的，这里 su(3) 的两个 Cartan 算子并非那样显然。关于 su(3) 动力系统的求解细节，可参考文献 [27]。

7) 一般的线性半单李代数系统和坐标与动量的二次型的 Hamilton 系统

前面讨论的线性代数动力系统的李代数的阶都比较低，代数动力学解法也比较简单。对于阶数比较高的李代数线性代数系统求解就比较复杂，因此需要运用一些群论技巧，使问题尽可能简化。

对于一般的半单李代数线性系统[61]，给出一种简便的解法。半单李代数 $g$ 在 Cartan 标准形式下，$g = \left\{\hat{H}_i, \hat{E}_\alpha, \hat{E}_{-\alpha}\middle| i=1,2,\cdots,l;\alpha=1,2,\cdots,\dfrac{n-l}{2}\right\}$($n$ 为李代数的阶，$l$ 为其秩)，代数关系为

$$\left.\begin{array}{l}[\hat{H}_i, \hat{H}_j] = 0 \\ {[\hat{H}_i, \hat{E}_\alpha] = \alpha_i\hat{H}_i} \\ {[\hat{E}_\alpha, \hat{E}_{-\alpha}] = \sum\limits_{i=1}^{l}\alpha_i\hat{H}_i} \\ {[\hat{E}_\alpha, \hat{E}_\beta] = N_{\alpha\beta}\hat{E}_{\alpha+\beta}, (\alpha+\beta)\text{是根}}\end{array}\right\} \tag{14-100}$$

$g$ 的线性动力系统的 Hamilton 量为

$$\hat{H}(t) = \sum_{i=1}^{l} a_i\hat{H}_i + \sum_{\alpha=1}^{m}(b_\alpha\hat{E}_\alpha + c_\alpha\hat{E}_{-\alpha}) \tag{14-101}$$

时间有关的 Schroedinger 方程 (14-21) 可以通过两次规范变换求解。第一次规范变换的目的是消去 $\hat{H}$ 中的 $\hat{E}_\alpha$ 项。设

$$U_1 = \mathrm{e}^{\mathrm{i}f_m \hat{E}_m}\mathrm{e}^{\mathrm{i}f_{m-1}\hat{E}_{m-1}}\cdots\mathrm{e}^{\mathrm{i}f_1\hat{E}_1} \tag{14-102}$$

令变换后的 Hamilton 量中 $\hat{E}_\alpha$ 的系数为 0，可得 $f_i$ 的微分方程

$$\frac{\mathrm{d}f_i}{\mathrm{d}t} = F_i(a_i, b_\alpha, c_\alpha, f_1\cdots f_m) \tag{14-103}$$

其中，$F_i$ 为 $f_i$ 的多项式。而变换后的 $\hat{H}^{(1)}$ 为

$$\hat{H}^{(1)}(t) = \sum_{i=1}^{l} a_i'(t)\hat{H}_i + \sum_{\alpha=1}^{m} c_\alpha'(t)\hat{E}_{-\alpha} \tag{14-104}$$

再实施第二次规范变换，目的在于消去 $\hat{H}^{(1)}$ 中的 $\hat{E}_{-\alpha}$ 项。设

$$U_2(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}g_m \hat{E}_{-m}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}g_{m-1}\hat{E}_{-m+1}}\cdots\mathrm{e}^{\mathrm{i}g_1\hat{E}_{-1}} \tag{14-105}$$

要求变换后 $\hat{H}^{(2)}$ 中 $\hat{E}_{-\alpha}$ 的系数为零，得 $g_i$ 的微分方程

$$\frac{\mathrm{d}g_i}{\mathrm{d}t} = G_i(a_i', c_\alpha'; g_1, \cdots, g_m) \tag{14-106}$$

其中，$G_i$ 是 $g_i$ 的多项式。这时变换后的 $\hat{H}^{(2)}$ 为

$$\hat{H}^{(2)} = \sum_{i=1}^{l} d_i\hat{H}_i (d_i = a_i') \tag{14-107}$$

$\hat{H}^{(2)}$ 对应的 Schroedinger 方程很容易求解

$$\left.\begin{aligned} &\psi_n^{(2)}(t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta_n(t)}\,|\phi_n\rangle \\ &\hat{H}_i|\phi_n\rangle = n_i\,|\phi_n\rangle \\ &\theta_n(t) = \sum n_i\int_0^t d_i(\tau)\mathrm{d}\tau \end{aligned}\right\} \tag{14-108}$$

$\hat{H}(t)$ 的动力学非绝热基矢为

$$\psi_n^{(t)} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta_n(t)}(U_2U_1)^{-1}\psi_n^{(2)}(t) = \sum_{\{m_i\}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta_n(t)}D_{mn}\,|\phi_m\rangle \tag{14-109}$$

其中，广义 D- 函数, 定义为

$$D_{mn}(t) = \left\langle\phi_m\left|U_1^{-1}(t)U_2^{-1}(t)\right|\phi_n\right\rangle \tag{14-110}$$

对于坐标和动量二次型的 Hamilton 系统[62]

$$\hat{H}(t) = \sum_{ij=1}^{N}[A_{ij}(t)\hat{p}_i\hat{p}_j + B_{ij}(t)\hat{q}_i\hat{q}_j + C_{ij}(t)(\hat{p}_i\hat{q}_j + \hat{q}_j\hat{p}_i)]$$

$$=\sum_{ijz1}^{N}\left[a_{ij}(t)\left(\hat{a}_i^+\hat{a}_j+\frac{1}{2}\delta_{ij}\right)+b_{ij}(t)\hat{a}_i^+\hat{a}_j^++b_{ij}^*\hat{a}_i\hat{a}_j\right] \tag{14-111}$$

具有 sp(2$n$) 代数结构，可按前面类似的步骤求解：先进行只包生成元 $\{\hat{a}_i^+\hat{a}_j^+\}$ 的规范变换，消去 $\hat{H}$ 中 $\{\hat{a}_i^+\hat{a}_j^+\}$ 项的系数；再进行只含生成元 $\{\hat{a}_i\hat{a}_j\}$ 的变换，消 $\hat{H}$ 中的 $\{\hat{a}_i\hat{a}_j\}$ 项；剩下的项 $\{\hat{a}_i^+\hat{a}_j\}$ 是 SU($N$) 群的生成元，再分别进行其升算子陪集空间和降算子陪集空间的规范变换，得到只含 Cartan 算子 $\{\hat{a}_i^+\hat{a}_i\}$ 的 $\hat{H}$，从而完成了最佳规范变换，Schroedinger 方程就容易求解了。

对于一般的半单李代数系统 (包括非线性系统)，如果时间相关性由匀速推转产生，则可用推转方法求解[63] 。

2. 非线性可积系统

14.3.1 小节研究的非自治线性系统是可积的，系统的状态具有好的量子数，描述规则的量子运动。非线性量子系统是更为真实而有趣的系统，大多数非线性系统是不可积的，系统的守恒量受到破坏，描述的是不规则的量子运动。但也有一些非线性系统，具有动力学对称性和相应的守恒的量子数，仍然描述某种规则的量子运动。本节就要研究这类非线性代数动力系统。

1) 腔场量子电动力学中 J-C 模型的推广 ——su($N$) 非线性动力系统[20]

考虑 $N$ 能级原子与单模腔场的相互作用，系统的 Hamilton 量可以写成

$$\hat{H}(t)=\hat{H}_a(t)+\hat{H}_f(t)+\hat{H}_i(t) \tag{14-112}$$

$N$ 能级原子的 Hamilton 量为

$$\hat{H}_a(t)=\sum_{i=1}^{N}\omega_i(t)b_i^tb_i \tag{14-113}$$

单模腔场的 Hamilton 量为

$$\hat{H}_f(t)=\omega(t)a^+a+\rho(a^ta,t) \tag{14-114}$$

原子和辐射场交换 $K$ 个光子的相互作用有三种类型

$$\hat{H}_i(t)=\sum_{i=2}^{N}\rho_i(a^+a,t)a^kb_i^+b_{i-1}+h.c(\Xi-\text{型}) \tag{14-115a}$$

$$\hat{H}_i(t)=\sum_{i=2}^{N}\rho_i(a^+a,t),a^kb_i^+b_1+h.c(V-\text{型}) \tag{14-115b}$$

$$\hat{H}_i(t)=\sum_{i=2}^{N}\rho_i(a^+a,t)a^{+k}b_i^+b_N+h.c(\Lambda-\text{型}) \tag{14-115c}$$

其中，$\rho, \rho_i$ 表示辐射场的非线性效应。上述 Hamilton 是高度非线性的，但是有两个不变量：总电子数算子

$$N_{\mathrm{e}} = \sum_{i=1}^{N} b_i^{+} b_i \tag{14-116}$$

和激发数算子

$$\varDelta = a^{+}a + k\sum_{i=1}^{N} \mathrm{i} b_i^{+} b_i (\Xi\text{– 型}) \tag{14-117a}$$

$$\varDelta = a^{+}a + k\sum_{i=1}^{N} b_i^{+} b_i (V\text{– 型}) \tag{14-117b}$$

$$\varDelta = a^{+}a - k\sum_{i=1}^{N-1} b_i^{+} b_i (\Lambda\text{– 型}) \tag{14-117c}$$

考虑单电子情况。对 Ξ—型，引进 $U(N)$ 生成子

$$A_{ij} = \sqrt{\frac{(\varDelta - ki)!(\varDelta - kj)!}{\varDelta!\varDelta!}} a^{ki} a^{+ki} b_i^{+} b_j \tag{14-118}$$

则 $\hat{H}$ 可写成 $A_{ij}$ 的线性函数，但系数是不变算子 $\varDelta$ 的函数

$$\hat{H} = \omega\varDelta + \sum_{i=1}^{N} \omega_i'(\varDelta) A_{ii} + \sum_{i=2}^{N} (f_i(\varDelta) A_{i,i-1} + h.c) \tag{14-119a}$$

其中，

$$\omega_i'(\varDelta) = \omega_i - k\mathrm{i} + \rho(\varDelta - k\mathrm{i}) \tag{14-119b}$$

$$f_i(\varDelta) = \rho_i(\varDelta - k\mathrm{i}) \sqrt{\frac{(\varDelta - k(i-1))!}{(\varDelta - ki)!}} \tag{14-119c}$$

很容易证明 $A_{ij}$ 满足 $u(N)$ 代数，$\varDelta$ 为不变算子

$$[\varDelta, A_{ij}] = 0, [A_{ij}, A_{kl}] = \delta_{jk} A_{il} - \delta_{il} A_{kj} \tag{14-120}$$

电子数守恒要求

$$\sum_{i=1}^{N} A_{ii} = \sum_{i=1}^{N} b_i^{+} b_i = 1 \tag{14-121}$$

$u(N)$ 代数变成 su$(N)$ 代数

类似地，对 V-型，$U(N)$ 生成元为

$$A_{i1} = \sqrt{\frac{(\varDelta - k)!}{\varDelta!}} a^k b_i^{+} b_1 = A_{1i}^{+}, (i \neq 1) \tag{14-122a}$$

$$A_{11} = b_1^{+} b_1, A_{ij} = b_i^{+} b_j = A_{ji}^{+} (i, j \neq 1) \tag{14-122b}$$

而 $\hat{H}$ 线性化为

$$\hat{H} = \omega \Delta + \sum_{i=1}^{N} \omega_i'(\Delta) A_{ii} + \sum_{i=2}^{N} (f_i(\Delta) A_{i1} + h.c) \tag{14-123a}$$

其中,

$$f_i(\Delta) = \rho_i(\Delta - k)\sqrt{\frac{\Delta!}{(\Delta - k)!}} \tag{14-123b}$$

$$\omega_1'(\Delta) = \omega_1 + \rho(\Delta), \omega_i'(\Delta) = \omega_i - k + \rho(\Delta - k), (i \neq 1) \tag{14-123c}$$

对 Λ-型

$$A_{iN} = \sqrt{\frac{\Delta!}{(\Delta + k)!}} a^{+k} b_i^+ b_N = A_{Ni}^+ (i \neq N) \tag{14-124a}$$

$$A_{NN} = b_N^+ b_N, A_{ij} = b_i^+ b_j = A_{ji}^+ (i, j \neq N) \tag{14-124b}$$

$$\hat{H} = \omega \Delta + \sum_{i=1}^{N} \omega_i'(\Delta) A_{ii} + \sum_{i=1}^{N-1} (f_i(\Delta) A_{iN} + h.c) \tag{14-125a}$$

$$\omega_i'(\Delta) = \omega_i + k + \rho(\Delta + k), (i \neq N), \omega_N'(\Delta) = \omega_N + \rho(\Delta) \tag{14-125b}$$

$$f_i(\Delta) = \rho_i(\Delta - k)\sqrt{\frac{(\Delta + k)!}{\Delta!}} \tag{14-125c}$$

这样，通过非线性变换，实现了非线性广义 J-C[17] 模型的线性化。在 $\Delta$ 的本征值 (激发数或光子数 $m$) 标志的不可约表示空间中，Hamilton 量 $\hat{H}$ 是 su($N$)[20] 生成元的线性函数，可以按前面介绍的方法实现求解。因为 su($N$) 是半单李代数，按照 14.2 节的定理，时间有关的广义 J-C 模型具有时间有关的动力学对称性，因而是可积系统，其状态具有好的守恒量子数。应当指出，由于考虑的是单电子系统，su($N$) 的不可约表示为 $N$ 维基础表示，用 $\Gamma(m,k,N)$ 标志，其中 $m$ 是 $\Delta$ 的本征值 (与光子数相联系)，$k$ 是交换的光子数，$N$ 是原子能级数。$\hat{H}$ 的本征态，是被光子包围着的电子，即穿了衣服的电子，是处于不同能级的叠加态。而光子态也是与电子态相伴随，处于 $N$ 个不同光子数状态的叠加，二者构成一个复杂的电子–光子纠缠态。文献 [29] 给出了三能级 Ξ-型 Hamilton 量的本征解，能级可以用简单的代数公式解析地表示出来，有兴趣的读者可参看原文。

2) Feynman 的 L-S 耦合系统的推广 —— 描述能级超精细结构的 su($N$) 动力系统

Feynman 的 L-S 耦合系统[64] 的 Hamilton 量可写成

$$\hat{H} = b\vec{S} \cdot \vec{L} - (\gamma_s \vec{S} + \gamma_l \vec{L}) \cdot \vec{B} \tag{14-126a}$$

若磁场沿 $z$ 方向，则

$$\hat{H} = \frac{1}{2} b(S_+ L_- + S_- L_+) + bS_z L_z - (\gamma_s L_z + \gamma_l L_z) B \tag{14-126b}$$

当 $S=L=1/2$ 时，Feynman 求得了其严格解 [65−67]。Feynman L-S 耦合系统看起来简单，实际上是非线性系统，对双能级系统的量子力学和量子光学产生过重要影响。这里从两方面推广它：①从 $S=L=1/2$ 到一般的 $S,L$ 情况；②从 $b,\gamma_s,\gamma_l,B$ 不依赖于时间的自治系统，推广到这些参数与时间有关的非自治系统。这种系统可用于描述原子和分子中的自旋一自旋或自旋一轨道耦合系统在外磁场中的能级超精细结构。

Feynman L-S 耦合系是具有 $\mathrm{su}_s(2)\oplus\mathrm{su}_L(2)$ 代数结构的双线性系统，其代数结构为

$$\left.\begin{aligned}&[S_i,S_j]=\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}S_k,\\&[L_i,L_j]=\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}L_k,\\&[S_i,L_j]=0\end{aligned}\right\}\tag{14-127}$$

先考虑 $s=1/2$，$L$ 为任意的情况。系统的不变算子有 $S^2,L^2,J_z=S_z+L_z$。引进非线性变换

$$A_+=\frac{S_+L_-}{\sqrt{L^2-J_z^2+\dfrac{1}{4}}}=A_-^+,A_z=S_z\tag{14-128}$$

可证 $A_\alpha$ 满足 su(2) 代数关系

$$[A_+,A_-]=2A_z,[A_z,A_\pm]=\pm A_\pm\tag{14-129}$$

而且

$$A^2=S^2=s(s+1)=\frac{3}{4}\tag{14-130}$$

用 $A_\alpha$ 表象，$\hat{H}$ 可写成

$$\hat{H}(t)=X_1(t)A_x+X_3(t)A_z+C(t)\tag{14-131a}$$

其中

$$A_x=\frac{1}{2}(A_++A_-)\tag{14-131b}$$

$$X_1(t)=b(t)\sqrt{L^2-J_z^2+\frac{1}{4}}\tag{14-131c}$$

$$X_3(t)=b(t)J_z+B(t)[\gamma_l(t)-\gamma_s(t)]\tag{14-131d}$$

$$C(t)=-B(t)\gamma_l(t)J_z-\frac{1}{4}b(t)\tag{14-131e}$$

在 $\{L^2,S^2,J_z\}$ 确定的不可约子空间中，$X_1,X_3,C$ 是普通数，$\hat{H}(t)$ 是 su(2) 生成元 $A_\alpha$ 的线性函数。因此，时间有关的 L-S 耦合系统具有时间有关的动力学对称性，是可积系统，可以按前面介绍的方法求解。

对 $S=1$ 的情况，引进非线性变换

$$A_{21}=\frac{(S_-S_+)}{2\sqrt{2L^2-2J_Z(J_Z+1)}}(S_+L_-)\tag{14-132a}$$

$$A_{32}=\frac{(S_+L_-)}{2\sqrt{2L^2-2J_Z(J_Z-1)}}(S_+S_-) \tag{14-132b}$$

$$A_{31}=\frac{(S_-^2L_-^2)}{2\sqrt{[L^2-J_Z(J_Z+1)][L^2-J_Z(J_Z-1)]}} \tag{14-132c}$$

$$A_{11}=\frac{(S_-^2S_+^2)}{4(J_Z+1)}(S_ZL_Z),A_{33}=\frac{(S_+^2S_-^2)}{4(J_Z-1)}(S_ZL_Z) \tag{14-132d}$$

$$A_{22}=1-A_{11}-A_{33} \tag{14-132e}$$

$$A_{ij}^+=A_{ji} \tag{14-132f}$$

可以证明 $A_{ij}$ 满足 su(3) 代数关系，在 $\{L^2,S^2,J_z\}$ 确定的不可约表示空间中，$\hat{H}(t)$ 是 $A_{ij}$ 的线性函数。

对于 $S,L$ 为一般情况，设 $l>s,N=2s+1$。可以类似地证明，引进 su$(N)$ 生成元 $A_{ij}$ 把 $\hat{H}(t)$ 表示成 $A_{ij}$ 的线性函数[68]

$$\hat{H}(t)=\sum_{i=1}^{N}\alpha_i(t)A_{ii}+\sum_{i=1}^{N-1}[\beta_i(t)A_{i+1,i},\mathrm{i}+h.c]+C(t) \tag{14-133a}$$

$$\alpha_i(t)=\{b(t)J_z+[\gamma_l(t)-\gamma_s(t)]B(t)\}m_i-b(t)m_i^2 \tag{14-133b}$$

$$\beta_i(t)=\frac{1}{2}b(t)\{[S^2-m_i(m_i+1)][L^2-(J_z-m_i)(J_z-m_i^-1)]\}^{\frac{1}{2}} \tag{14-133c}$$

$$C(t)=-\gamma_l(t)B(t)J_z,m_i=\mathrm{i}-(N+1)/2 \tag{14-133d}$$

这样彻底解决了推广的 L-S 耦合系统的线性化与求解问题。

考虑粒子自旋以后的时间有关的 Landau 系统，则须处理 sp(6) 与 L-S 系统的耦合，这是更复杂的非线性系统，可用类似的方法处理。

3) 具有偶极–偶极相互作用的双原子系统 ——su$(N)$ 动力系统

量子光学研究的电子处于里德堡高 $n$ 态的原子, 它们之间很容易产生偶极–偶极相互作用。对于双原子系统[68]，Hamilton 量可写成[69,70]

$$\hat{H}(t)=\sum_{i=1}^{N}\omega(i)b_i^+b_i+\sum_{i=1}^{N'}\omega'(j)d_j^+d_j+\sum_{i=1}^{N-1}\sum_{j=2}^{N'}[\Omega(i,j)b_{i+1}^+b_id_{j-1}^+d_j+h.c] \tag{14-134}$$

其中，第一、二项表示 $N$ 能级原子和 $N'$ 能级原子的 Hamilton 量，第三项表示两原子之间的偶极–偶极相互作用。考虑每个原子内只有一个电子参与相互作用，则电子数守恒有 $\sum\limits_i b_i^+b_i=1,\sum\limits_i d_i^+d_i=1$。另一个守恒量为激发算子

$$\Delta=\sum_{i=1}^{N}\mathrm{i}b_i^+b_i+\sum_{j=1}^{N'}\mathrm{j}d_j^+d_j \tag{14-135}$$

设 $N' > N$，在 $\varDelta$ 的本征值确定的不可约表示空间内，设基矢 $|M,\mathrm{j}\rangle$ 是 $\varDelta$ 和 $\sum\limits_i \mathrm{i} b_i^+ b_i$ 的本征态。

$$\left\{\varDelta, \sum_i \mathrm{i} b_i^+ b_i\right\} |M,\mathrm{j}\rangle = \{M,\mathrm{j}\} \, |M,\mathrm{j}\rangle \tag{14-136}$$

引进 su($N$) 生成元，满足

$$A_{ij} \, |M,k\rangle = \delta_{jk} | \, M,\mathrm{i}\rangle \tag{14-137}$$

易证 $A_{ij}$ 满足 su($N$) 对易关系

$$\left.\begin{aligned} &[A_{ij}, A_{kl}] = \delta_{jk} A_{il} - \delta_{il} A_{jk} \\ &A_{ij}^+ = A_{ji}, \sum_{i=1}^{N} A_{ii} = 1 \end{aligned}\right\} \tag{14-138}$$

$\hat{H}$ 可以写成 $A_{ij}$ 的线性函数

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} [\omega(i) + \omega'(\varDelta - i)] A_{ii} + \sum_{i=1}^{N-1} [\varOmega(\mathrm{i}, \varDelta - \mathrm{i}) A_{i+1,i} + h.c] \tag{14-139}$$

$A_{ij}$ 的具体表达式为

$$A_{ij} = \sum_{k=i-j+1}^{N'} b_i^+ b_j d_{k+j-i}^+ d_k, (i \geqslant j) \tag{14-140}$$

这样，在 $\varDelta$ 的本征值 $M$ 确定的不可约表示空间内，实现了该系统 Hamilton 量的线性化。$\varDelta$ 确定的不可约表示为 su($N$) 的基础表示，具有 $N$ 个基矢。

4) 三能级原子与双模辐射场的作用 —— 不衰变态

考虑三能级原子由两种频率的辐射场驱动[71]：$\hbar\omega_1$ 辐射场引起 $|1\rangle$—$|3\rangle$ 跃迁，$\hbar\omega_2$ 辐射场引起 $|2\rangle$—$|3\rangle$ 跃迁，原子能级从高到低的次序为 $|1\rangle$，$|2\rangle$，$|3\rangle$，系统的 Hamilton 量为

$$\begin{aligned} \hat{H} = &\sum_{i=1}^{3} E_i \sigma_{ii} + \hbar\omega_1 a_1^+ a_1 + \hbar\omega_2 a_2^+ a_2 + \\ &\hbar g_1(\sigma_{13} a_1 + \sigma_{31} a_1^+) + \hbar g_2(\sigma_{23} a_2 + \sigma_{32} a_2^+) \end{aligned} \tag{14-141}$$

其中，$\sigma_{ij} = |i\rangle\langle j| \, , (i,j = 1,2,3)$ 是能级跃迁算子，$a_1^+(a_1), a_2^+(a_2)$ 为两种辐射场的产生 (湮灭) 算子。这是一个更复杂的非线性系统，有两个不变算子 (激发算子)

$$N_1 = a_1^+ a_1 + \sigma_{11}, N_2 = a_2^+ a_2 + \sigma_{22} \tag{14-142}$$

引进 su(3) 生成元

$$\left.\begin{array}{l} A_{ii}=\sigma_{ii}, A_{13}=N_1^{-1/2}\sigma_{13}a_1, A_{23}=N_2^{-1/2}\sigma_{23}a_2 \\ A_{12}=N_1^{-1/2}N_2^{-1/2}\sigma_{12}a_1a_2^+, A_{ij}=A_{ji}^+ \end{array}\right\} \tag{14-143}$$

$A_{ij}$ 具有性质：$A_{ij}A_{ke}=\delta_{jk}A_{il}$，对于单电子情况 $\sum\limits_{i=1}^{3}\sigma_{ii}=1$。$\hat{H}$ 可以写成

$$\hat{H}=\hbar\omega_1N_1+\hbar\omega_2N_2+E_3+\varDelta_1A_{11}+\varDelta_2A_{22}+\tilde{g}_1(A_{13}+A_{31})+\tilde{g}_2(A_{23}+A_{32}) \tag{14-144}$$

其中，$\varDelta_{1,2}=E_{1,2}-E_3-\hbar\omega_{1,2}$ 表示失调能，$\tilde{g}_{1,2}=\hbar g_{1,2}N_{1,2}^{1/2}$ 表示重正化的耦合常数。

式 (14-144)$\hat{H}$ 可在下述幺正变换下对角化

$$U_g=\mathrm{e}^{\alpha(A_{12}-A_{21})}\cdot\mathrm{e}^{\beta(A_{23}-A_{32})}\cdot\mathrm{e}^{r(A_{13}-A_{31})} \tag{14-145}$$

求得其本征能量与本征态。这时电子态是与辐射场耦合的穿了衣服的状态 $\varPsi_{n_1,n_2}^i(i=1,2,3,n_i$ 为 $N_i$ 的本征值), 是电子与两种光子的纠缠态。

如果再增加第四个最低能级 $|4\rangle$，再考虑背景辐射场 $(a_k^+,a_k)$ 引起能级 $|1\rangle$—$|4\rangle$ 和 $|2\rangle$—$4\rangle$ 之间的跃迁，则可以通过调节辐场场 $\hbar\omega_1$ 和 $\hbar\omega_2$ 的强度，使得 $\varPsi_{n_1,n_2}^1$ 成为不衰变的状态[71]。这种不衰变的激发态又称 trapped state(落入陷阱的态)[72]，对于产生无反转激光有意义[73]。

5) 运动原子与腔场的相互作用

考虑单模腔场与二能级运动原子的相互作用[74]，其 Hamilton 量为

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}_x^2}{2m}+\hbar\omega_0S_z+\hbar\omega a^+a+\hbar\varOmega(a^+S_-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}+h.c) \tag{14-146}$$

该系统有两个不变算子，一个为激发算子

$$N=a^+a+S_z+\frac{1}{2} \tag{14-147}$$

另一个是总动量

$$\hat{P}_{\mathrm{tot}}=\hat{p}_x+\hbar ka^+a \tag{14-148}$$

$\hbar k$ 为运动原子的动量。引进不变算子

$$\hat{P}_g=\hat{P}_{\mathrm{tot}}-\hbar k,N=\hat{p}_x-\hbar k\left(S_z+\frac{1}{2}\right) \tag{14-149}$$

和 su(2) 算子

$$\left.\begin{array}{l} \hat{J}_+=N^{-\frac{1}{2}}S_+a\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} \\ \hat{J}_-=N^{-\frac{1}{2}}S_-a^+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \\ J_0=S_z \end{array}\right\} \tag{14-150}$$

则

$$\hat{H} = E(N, \hat{P}_g) + \varDelta(\hat{P}_g)\hat{J}_0 + \hbar\varOmega N^{\frac{1}{2}}(\hat{J}_+ + \hat{J}_-) \tag{14-151a}$$

其中

$$E(N, \hat{P}_g) = \frac{1}{2m}\left(\hat{P}_g^2 + \hbar k\hat{P}_g + \frac{1}{2}\hbar^2k^2\right) + \hbar\omega\left(N - \frac{1}{2}\right) \tag{14-151b}$$

$$\varDelta(\hat{P}_g) = (\hbar k\hat{P}_g + \hbar^2k^2/2)/m + \hbar(\omega_0 - \omega) \tag{14-151c}$$

在 $N$ 和 $\hat{P}_g$ 的本征值确定的不可约表示空间中，$\hat{H}$ 是 su(2) 生成元 $(J_+, J_-, J_0)$ 的线性函数。由此，容易求得其本征解，包含了运动原子的多普勒效应和反冲效应。

6) 其他非线性可积系统

(1) 核四极共振——非线性 su(2) 动力系统

核四极共振的 Hamilton 量为

$$\hat{H}(t) = [\vec{\varOmega}(t)\cdot\vec{J}]^2 \tag{14-152a}$$

$$\vec{\varOmega}(t) = \varOmega[\sin\theta\cos\omega t, \sin\theta\sin\omega t, \cos\theta] \tag{14-152b}$$

$$\vec{J} = \{J_x, J_y, J_z\} \tag{14-152c}$$

其中，$J_i$ 表示核的自旋算子，$\vec{\varOmega}(t)$ 表示绕 $z$ 轴转动的磁场，$\omega$ 表示转动频率，$\varOmega$ 表示四级共振的强度。经规范变换

$$U_g(t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t J_z} \tag{14-153}$$

$\hat{\bar{H}}(t)$ 可变为

$$\hat{\bar{H}} = (\vec{\varOmega}\cdot\vec{J})^2 - \omega J_z \tag{14-154a}$$

$$\vec{\varOmega} = \varOmega(\sin\theta, 0, \cos\theta) \tag{14-154b}$$

这时 $\hat{\bar{H}}$ 是非线性的，它的本征值问题很容易进行数值研究[63]。

(2) su(1,1) 非线性动力系统

张胜利、李福利研究了下列两类 su(1,1) 非线性动力系统[75]。

①　$$\hat{H}_1 = A_1(t)I_0I_- + \mathrm{i}B_1(t)I_0 + C_1(t)$$

su(1，1) 生成元 $\{I_\alpha\}$ 定义为

$$I_- = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}, I_0 = x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + 1, I_+ = x^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + 2x \tag{14-155}$$

经规范变换

$$U_1(t) = \mathrm{e}^{-u_1(t)I_0I_- + v_1(t)} \tag{14-156}$$

$$\hat{\bar{H}} = f_1(t)(I_0 - \frac{1}{2})(f_1(t)\text{可用}u_1, v_1\text{表示}) \tag{14-157}$$

② $$\hat{H}_2 = A_2(t)I_-^2 + \mathrm{i}B_2(t)I_0 + C_2(t) \tag{14-158}$$

$\{I_\alpha\}$ 的表示同上。经规范变换

$$U_2(t) = \mathrm{e}^{u_2 I_0 + v_2} \tag{14-159}$$

$$\hat{\hat{H}}_2 = f_2(t)I_-^2 (f_2(t)\text{可用}u_2, v_2\text{表示} \tag{14-160}$$

$\hat{\hat{H}}_{1,2}$ 表象中的的解容易求得，变到 $\hat{H}(t)$ 表象中的解也不难。

(3) 时间有关的氢原子问题

张胜利研究了一类特殊的时间有关的氢原子问题[76]，其 Hamilton 量为

$$\hat{H}(t) = \frac{\hat{p}^2}{2m(t)} - \frac{\mathrm{e}^2(t)}{r} \tag{14-161}$$

即电子质量、电荷都与时间有关。如果 $m(t), e(t)$ 满足

$$m(t)e^2(t) = m_0 e_0^2 e^{c\int_0^t e^2(\tau)\mathrm{d}\tau} \tag{14-162}$$

则经两次规范变换

$$U_1(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha(t)r^2} \tag{14-163a}$$

$$U_2(t) = \mathrm{e}^{\beta(r\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}r)} \tag{14-163b}$$

$\hat{H}$ 变为

$$\hat{\hat{H}}(t) = f(t)\hat{H}_0 \tag{14-164a}$$

$$\hat{H}_0 = \frac{p^2}{2m} - \frac{e_0^2}{r} \tag{14-164b}$$

即静态氢原子的 Hamilton 量。其中

$$f(t) = \frac{m_0\eta(t)}{m(t)} \tag{14-164c}$$

他求得了动力学非绝热基矢，是径向存在呼吸运动的氢原子波函数，而且有一个径向的集体运动速度势

$$\psi_{n\ell m}(r,\theta,\varphi,t) \sim \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha(t)\eta(t)r^2}}{r} G_{n\ell}(\eta(t)r)Y_{\ell m}(\theta,\varphi) \tag{14-165}$$

其中，$\eta(t) = \exp\left[c\int_0^t e^2(\tau)\mathrm{d}\tau\right]$, $G_{ne}$ 是氢原子径向波函数。

如果 $m(t), e(t)$ 不满足上述特殊关系 (14-162)，则很难求得一般解。但若初始时刻电子处于基态，则可以求得时间有关的 Schroedinger 方程的解[77]。

还有一些其他的有趣的非线性动力系统问题，有可能用代数动力学方法求解，这里就不详述了。

### 14.3.2 不可积系统与量子无规运动

14.3.1 节用代数动力学方法研究了具有动力学对称性的规则运动的量子体系，包括线性代数动力学系统和可以线性化的非线性的代数动力学系统。这一节将用代数动力学方法研究不具有动力学对称性的非线性代数动力学系统，这类系统描述的是不规则的量子运动。

*1. 原子核中规则运动与无规运动的并存*

从核结构和核反应的实验和理论研究[78,79] 可以发现，在原子核这个量子系统中，既存在量子规则运动，又存在量子无规运动，而且这两类运动有时是并存的[80−82]。在核结构中，壳模型所描述的单粒子运动和集体运动模型所描述的低能核谱中的集体运动，是典型的量子规则运动，它们的特点是系统的状态具有守恒的好量子数，波函数和能级是这些好量子数的规则函数。这种量子规则运动的动力学根源是系统的 Hamilton 量具有动力学对称性，因而这类系统可以用群论方法求解, 自然是可积的。14.3.1 小节研究的正是这类非自治系统。与之相反，复合核的能谱[83,84]，Bohr–莫特逊指出的各态历经的集体态[85] 是原子核中量子无规运动的代表。这类运动的特点是除能量、角动量、宇称等基本守恒量外，系统不再具有其他好的量子数、波函数和能级，由于众多复杂状态的混杂而表现得极不规则，在极端情况下表现出 GOE(高斯正交系综) 的统计特征[86,87]。量子无规运动的动力学根源在于粒子间的相互作用严重地破坏了系统的动力学对称性及相应的守恒量子数。在核反应中，光学模型和直接反应模型所描述的核反应过程是量子规则运动的代表，而复合核反应则是量子无规运动的例子。它们的特点和动力学根源与核结构的情况类似。核结构对应于系统的 Hamilton 量的负能间断谱问题，而反应则对应于正能连续谱问题。由于连续谱，反应问题就更为复杂。

在核物理中，量子规则运动和量子无规运动并存的典型例子，在核结构中是热原子核的巨共振[81,88]，在核反应中是耗散的重离子核反应[89,90]。热原子核中核子运动是极其无规的，以至于需要引进温度，而建筑在它上面的巨共振则是高度相干的规则的集体运动态。因此，热原子核的巨共振生动地体现出原子核中无规运动与规则运动的并存。在耗散的重离子核反应中，入射离子与靶核之间规则的相对运动的能量，由于核子–核子之间碰撞，不断地转化为核子无规运动的能量，原子核系统从冷变热，规则的相对运动能量就耗散为内部核子的热运动能量。在这里，量子规则运动和量子无规运动，不仅是并存的，而且是转化的[89,90]。因此，在原子核中，量子规则运动和无规运动的并存与交织是一个事实，问题是如何统一地描述它们。关于这一有趣的课题将在别的地方专门讨论。

既然量子规则运动与系统的动力学对称性的保持相联系，而量子无规运动与系统的动力学对称性的严重丧失相联系，而动力学对称性又可以用群论或代数的

语言加以描述。因此，无论量子规则运动，还是量子无规运动，只要系统的代数结构知道了，就可以用代数动力学的方法加以研究。下面就原子核量子系统，对量子规则运动和无规则运动的统一描述提出一些初步的想法。

2. 描述原子核的规则运动和无规运动的基本思路

限于原子核多体系统的结合态即核结构问题。对于核结构问题，自洽平均场表象是研究问题的很好的出发点。如果核子–核子之间存在二体相互作用，则原子核的 Hamilton 量可以写成

$$\hat{H}=\sum_{j}\varepsilon_j a_{jm}^{+}a_{jm}+\frac{1}{4}\sum_{\{j_im_i\}}\langle j_1m_1j_2m_2\,|V|\,j_3m_3j_4m_4\rangle a_{j_1m_1}^{+}a_{j_2m_2}^{+}a_{j_3m_3}a_{j_4m_4} \tag{14-166}$$

其中，$a_{jm}^{+}(a_{jm})$ 是自洽平均场中独立粒子态 $|jm\rangle$ 的产生 (湮灭) 算符。式 (14-166) 第一项表示自洽平均场中独立核子系统的 Hamilton 量，第二项代表平均场以外的剩余相互作用。显然，原子核系统的 Hamilton 量，在二体相互作用近似下，是自洽平均场产生的独立粒子态的产生、湮灭算符 $a_{jm}^{+},a_{jm}$ 的二次型 $\{a_{jm}^{+}a_{j'm'}^{+},a_{jm}^{+}a_{j'm'},$ $a_{jm}a_{j'm'}\}$ 的函数。上述二次型生成 Hilbert 空间的无穷维李代数，决定了原子核多体系统结合态的一切可能的运动模式，因而构成了系统的运动学代数[82]。

原子核的平均场产生的单粒子态具有壳层结构，把无穷维 Hilbert 空间分解成一系列有限维的壳层子空间和相应的壳层运动学群的子代数

$$\mathrm{SO}(4\Omega_i)=\{a_{j_im_i}^{+}a_{j_i'm_i'}^{+},a_{j_i'm_i'}a_{j_iim_i},a_{j_im_i}^{+}a_{j_i'm_i'}\} \tag{14-167}$$

其中，$2\Omega_i$ 是第 $i$ 个大壳层内的状态数。大壳内状态的分布情况完全依赖于平均场的性质。因此，自洽平均场决定了大壳运动群和大壳代数的类型和性质，通过壳代数的一切可能的子代数，又决定了壳内各种可能的运动模式。

同时，自洽平均场还决定了剩余相互作用的性质。正是这种剩余相互作用使壳代数分化成确定的子代数链，从可能的运动模式中挑选出物理上可实现的运动模式，即从运动学群中挑选出动力学对称群。

上述把无穷维 Hilbert 空间约化为有限维壳层子空间的做法在物理上是很好的近似。对低能核谱问题，一个大壳代数就是合适的近似。如果处理的问题激发能较高，则可以把几个大壳合并成一个超大壳加以处理。对于原子核多体问题，一个大壳或超大壳内多体系统的 Hilbert 空间的维数通常是很大的，往往超出现代计算机的处理能力。因此，需要额外的简化近似去减少 Hilbert 空间的维数。自然界自身把其运动模式从低能到高能划分为界限鲜明的层次，而在每个层次又把运动分化为不同的模式，使人们可以分别加以研究。下面看运动模式是如何分化的。

设运动学群 $G$ 的生成元为

$$\hat{x}_\alpha=\left\{a_{jm}^{+}a_{j'm'}^{+},a_{jm}a_{j'm'},a_{jm}^{+}a_{j'm'}\right\} \tag{14-168}$$

则系统的 Hamilton 量可写成

$$\hat{H}(\hat{x}_\alpha) = \hat{H}_0 + V \tag{14-169a}$$

$$\hat{H}_0 = \sum_\alpha c_\alpha \hat{x}_\alpha, \quad \hat{V} = \sum_{\alpha\beta} c_{\alpha\beta} \hat{x}_\alpha \hat{x}_\beta \tag{14-169b}$$

其中，$\hat{H}_0$ 是一体算子，代表平均场，$\hat{V}$ 是二体算子，代表剩余相互作用。设 $G$ 的群链为 $G \supset G_s$ 其中，CSCOII 为 $\{C, C_s\}$，$C$ 为 $G$ 的 Casimir 算子, $C_s$ 为 $G_s$ 的 Casimir 算子。

$\hat{H}(\hat{x}_\alpha)$ 可以具有下述三类结构。

(1) $\hat{H}(\hat{x}_\alpha)$ 是群 G 的某一个群链的 CSCOII 的函数

$$\hat{H}(x_\alpha) = \hat{H}[\{C, C_s\}] \tag{14-170}$$

相应的系统具有这一群链标志的动力学对称性和相应的运动模式。这种情况比较特殊，各种纯净的集体运动模型属于此类。

(2) $\hat{H}(\hat{x}_\alpha)$ 是 $G$ 的二条以上群链的 CSCOII 的函数

$$\hat{H}(\hat{x}_\alpha) = H[\{C, C_{s_1}\}, \{C, C_{s_2}\}, \cdots] \tag{14-171}$$

相应于这几条群链标志的运动模式的混杂。若一个群链占支配地位，则系统的运动模式由它决定，别的模式产生微扰。这是较普遍的情况，互作用 Bose 子模型和 Fermi 子动力学对称性模型[91] 都是从这种情况出发的。

十分有趣的发现是当两种差别很大的动力学对称性运动模式出现在同一个 Hamilton 量中，而且彼此强度相当时，系统的量子运动是极其无规的[92-96]。

(3) $\hat{H}(\hat{x}_\alpha)$ 不能表示成任何群链的 CSCOII 的函数

$$\hat{H}(\hat{x}_\alpha) \neq \hat{H}[C, C_s] \tag{14-172}$$

相应于高度不可积的系统和量子无规运动。

上述用群论和代数的观点对原子核的运动模式进行的分析，使得可以用代数动力学方法统一研究量子规则和量子无规运动，在 14.3.1 节中仔细研究了可积系统和规则运动，下面几小节将介绍几种研究量子无规运动的代数动力学方法。

3. 能级动力学 —— 研究量子规则运动向无规运动转化的方法[97-101]

一个具有动力学对称性的可积的量子系统，当加上破坏动力学对称性的相互作用之后，原来具有不同量子数相互交叉的能级会出现准交叉。如果把一条能级看作一个粒子，则破坏动力学对称性的相互作用产生的能级准交叉就像粒子–粒子碰撞一样，正是这些众多的能级准交叉或粒子–粒子碰撞，使得具有动力学对称性的规则的能级系统变得很不规则。就像分子之间的碰撞导致分子混沌运动一样，破坏

动力学对称性的相互作用也会使能级分布产生混沌。这种量子系统能级分布转变的过程，可以用能级动力学 (level dynamics)[97−101] 来描述。设系统的 Hamilton 量由具有动力学对称性的 $\hat{H}(0)$ 和破坏动力学对称性的 $\hat{V}$ 组成

$$\hat{H}(t)=\hat{H}(0)+\hat{V}t \tag{14-173}$$

$t$ 是像时间一样的可变的参数，表示微扰 $\hat{V}$ 的强度。运用 $\hat{H}(0)$ 的本征表象

$$\hat{H}(0)=x_n(0)\left|n(0)\right\rangle \tag{14-174}$$

$\hat{H}(t)$ 可以写成

$$\hat{H}(t)=\hat{H}_0(t)+\hat{V}^{\text{off}}t \tag{14-175}$$

其中，

$$\hat{H}_0(t)=\hat{H}(0)+\hat{V}^{\text{dia}}t \tag{14-176a}$$

$$\hat{V}^{\text{dia}}=\left(\hat{V}^{\text{dia}}_{nm}=\left\langle n(0)\left|\hat{V}\right|m(0)\right\rangle\delta_{nm}\right) \tag{14-176b}$$

$$\hat{V}^{\text{off}}=\left(\hat{V}^{\text{off}}_{nm}=\left\langle n(0)\left|\hat{V}\right|m(0)\right\rangle, n\neq m\right) \tag{14-176c}$$

显然 $\hat{V}^{\text{dia}}$ 与 $\hat{H}(0)$ 对易，仍保持原有的动力学对称性。

考虑 $\hat{H}(t)$ 的本征值问题

$$\hat{H}(t)\left|n(t)\right\rangle=X_n(t)\left|n(t)\right\rangle \tag{14-177a}$$

$$\left|n(t)\right\rangle=\sum_m C_{nm}(t)\left|m(0)\right\rangle \tag{14-177b}$$

设

$$P_n(t)=\left\langle n(t)\left|\hat{V}\right|n(t)\right\rangle \tag{14-178}$$

则从式 (14-177) 和式 (14-178) 可得 $X_n(t), P_n(t)$ 和 $C_{nm}(t)$ 的运动方程

$$\frac{\mathrm{d}X_n}{\mathrm{d}t}=P_n \tag{14-179a}$$

$$\frac{\mathrm{d}P_n}{\mathrm{d}t}=2\sum_{m(\neq n)}\frac{V_{nm}V_{mn}}{X_n-X_m} \tag{14-179b}$$

$$\frac{\mathrm{d}C_{nm}}{\mathrm{d}t}=\sum_{l\neq n}\frac{C_{lm}V_{ln}}{X_n-X_l} \tag{14-179c}$$

其中

$$\begin{aligned}V_{nm}(t)=&(m(t)|\hat{V}|n(t)\\=&\sum_{ll'}C_{ml}(t)C_{nl'}(t)\langle l(0)|\hat{V}|l'(0)\rangle\end{aligned} \tag{14-180}$$

方程 (14-179) 和方程 (14-180) 是能级动力学的基本方程，它描述具有动力学对称性的量子系统在破坏这种对称性的相互作用影响下，能级和波函数如何随微

扰强度 $t$ 的变化而演化。该方程十分类似于具有坐标 $X_n(t)$ 和动量 $P_n(t)$ 的多粒子系统的运动方程，其等效 Hamilton 量可写成

$$H_{\text{eff}} = \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N} P_n^2 - \sum_{m\neq n} V_{nm}V_{mn}\ln|X_n - X_m| \tag{14-181}$$

其中，$V_{nm}$ 是粒子 $n$ 与 $m$ 之间的相互作用，这是具有内禀状态的一维 Coulomb 气体的 Hamilton 量，不过相互作用与状态有关且依赖时间。因此，可以把多体系统的一些重要概念与方法用于分析能级动力学系统。研究表明，长程相互作用 ($|n-m|$ 较大的 $V_{nm}$) 产生一个平滑变化的平均场使能级产生光滑的变形，而短程相互作用 ($|n-m|$ 较小的 $V_{nm}$) 产生能级和波函数的不规则的涨落。正如分子之间短程碰撞是分子混沌的主要原因，能级的短程准交叉是产生能级无规分布的根源。文献 [100] 用简单的 su(2) 非线模型的计算机实验很好地证实了上述论断。

运用能级动力学还可以估计出现量子无规运动所需要的临界的微扰强度，研究无规运动基矢和规则运动基矢的一些特点。文献 [101] 的研究表明，当微扰强度等于 $H(0)$ 的平均能级间隔，每条能级平均发生 4 至 5 次准交叉，能级混杂宽度达到 16~32 条时，系统的能级出现 GOE 所标志的混沌行为，无规运动基矢和规则运动基矢具有十分不同的特点，能级和波函数的敏感性也是通过能级准交叉实现的。

4. 量子规则运动和无规运动的本征值逆问题

量子规则运动和无规运动的本征能谱和本征波函数的行为特征与系统的 Hamilton 量结构之间的联系，是本小节研究的主题[102]。这对于认识量子规则运动和无规运动的区别是十分重要的。

量子论的求解有两类问题：结合态本征值问题和散射与反应问题。量子力学的直接问题是给定系统的 Hamilton 量，计算出本征值问题和散射与反应问题的所有数据。上述问题的逆问题是给出一组充分和必要的数据，构造出一个 Hamilton 量能产生这些数据。在本征值问题的逆问题中，输入的数据是本征能量 $\{E_n\}$ 和本征波函数 $\{\psi_n\}$，它们代表问题的现象学方面，包含的信息量是非常大的。相反，由上述数据求出的 Hamilton 量却代表问题的本质方面即自然定律方面，它支配着其现象，而包含的信息量却比较少。直接问题求解的思路是演绎的，从 Hamilton 量出发推导出各种数据，这是一个信息量扩张的过程。而逆问题的思路则相反，是归纳的，从大量的现象学数据抽取出自然定律 ——Hamilton 量，这是一个信息量压缩的过程。

在文献 [102] 中，对于一个具有半单李代数结构的量子系统表述了本征值问题的逆问题。研究表明，只有能谱的信息，不足以判定一个量子系统是可积的还是不可积的；因为从任何分布形式的能谱 (GOE 分布，泊松分布或其他分布)，都可以构造一个可积系统的 Hamilton 量。从该论点出发，不难理解文献 [100] 发现的一

维 su(2) 系统的与通常观点相左的现象：它的能谱可以显示 GOE 统计或泊松统计。而通常的观点认为，一维可积系统不应当显示 GOE 统计[83]，而守恒系统的能谱的泊松统计至少应出现在二维系统[103]。与能谱的信息不同，波函数的信息对于判断一个量子系统的不可积性更为重要。因为破坏动力学对称性 (可积性) 的相互作用，会产生一个相似变换 (或幺正变换)，使得一个量子态可以不受守恒量子数限制而在更大的 Hilbert 空间漫游，使波函数产生出非常奇异而不规则的结构。这正好类似于经典混沌运动的轨道：破坏守恒量的相互作用会产生一个正则变换，使运动轨道突破守恒量所确定运动环面，而在更大的相空间漫游，产生出十分不规则的运动轨道。在这里，人们看到了量子–经典对应：在经典力学中，运动轨道对于判断系统的混沌行为是非常重要的；在量子力学中，波函数对于判断系统的不规则行为也是不可或缺的。

尽管本征值逆问题的代数途径对于理解量子规则运动和无规运动是有助的，但它不能回答一个问题：一个结构相对说来比较简单的 Hamilton 量，为什么在经典水平能产生混沌轨道，而在量子水平能产生复杂 GOE 统计？对这一困难问题，14.3.2 小节介绍的能级动力学能给出部分答案：破坏动力学对称性的相互作用产生的大量能级准交叉，就像分子碰撞一样，是产生能谱无规涨落和 GOE 统计的原因。

5. 量子规则运动系统和量子无规运动系统对外场的不同响应

量子系统对时间有关的外场的响应，是物理学许多分支感兴趣的问题。对这一问题的研究发现许多有趣的现象。当一个时间有关的外场作用到一个量子系统[104] 时，其响应可以分为三大类：弹性响应，黏性响应和弹性–塑性响应[105]。在核物理中，当两个重离子相互碰撞时，产生了一个时间有关的平均场。两个重原子核的耗散行为，依赖于平均场和两体剩余相互作用，二者都会破坏核子运动的守恒量子数，促使它们趋向无规运动。当核子的运动从规则运动向无规运动转化时，集体运动的线动量和角动量将向单粒子运动耗散。文献 [104] 用代数动力学方法和简单的模型对这一问题进行了研究，所得的主要结论如下。①当周期性外场保持系统的动力学对称性时，系统对外场的响应是弹性的。②当周期性外场破坏系统的动力学对称性时，系统对外场的响应分几种情况：a. 在绝热极限下，响应仍然是弹性的；b. 如果系统的初始状态是一个周期的时间演化算子 $U(T)$ 的本征态，则该系统的响应是准弹性的；c. 如果系统的初始状态不是 $U(T)$ 的本征态，则系统的响应是非弹性的，其细节依赖于系统的绝热的本征态的统计特性。如果绝热能谱极其无规，则响应是强耗散的，非绝热能级的准交叉在耗散中起着关键的作用。

6. 量子无规运动与量子统计的关联

原子核系统是一个保守系统。原子核系统显示出的量子无规运动和量子统计

特性，应当具有动力学根源。研究原子核系统的统计规律的动力学根源，或者推广一些研究量子统计规律的动力学根源，在物理学中具有基本的重要性。这有助于在物理学中的两类规律 —— 决定论的动力学规律和随机性的统计规律之间架设一条相互贯通和彼此理解的桥梁。显然，这一基本问题的解决是极其重要的、非常诱人的，也是十分困难的。

徐躬耦教授对这一基本而困难的问题进行了长期不懈的研究并取得了进展，加深了人们对这一问题的认识。他的前期工作可参考《量子混沌运动》[106] 一书，近期的研究成果可参看文献 [107] 和文献 [108]。

### 14.3.3　量子统计力学系统的耗散与退相干问题

最近, 代数动力学方法被推广应用于量子统计力学系统的耗散与退相干问题, 引进了群的左、右表示和复合表示, 把具有三明治结构的量子主方程转变成 Schroedinger 型的方程, 发现了 Bose–Einstein 凝聚体冷却的主方程和二能级原子与环境耦合的主方程的动力学代数结构和守恒量子数, 求得了它们的严格的解析解, 严格证明了这些系统趋于唯一的平衡态。代数动力学方法在量子统计力学系统中的应用，才刚开始, 具有广阔的发展前景。下面具体介绍四个例子, 对第一个例子比较详细介绍, 以阐明用代数动力学方法处理量子统计力学系统的主方程的基本精神与步骤; 对其他三个例子只简要介绍，有兴趣的读者可参考原文。

1. Bose–Einstein 凝聚体的 sympathetic cooling[109]

1) sympathetic cooling 模型

当用于产生 Bose–Einstein 凝聚体的 A 类原子的相互作用很弱、蒸发冷却的效率很低时, 就需要用另一种质量较大但温度很低 ($n$K) 的 B 类原子气体做冷库，与产生 Bose–Einstein 凝聚体的 A 类原子相互作用使之冷却。这种冷却称 sympathetic cooling。描述这种冷却过程的模型如下：系统的 Hamilton 量包括 A 类原子的 Hamilton 量 $H_{\mathrm{A}}$, B 类原子的 Hamilton 量 $H_{\mathrm{B}}$ 和两类原子相互作用的 Hamilton 量 $H_{\mathrm{AB}}$,

$$H = H_{\mathrm{A}} + H_{\mathrm{B}} + H_{\mathrm{AB}} \tag{14-182}$$

其中,

$$H_{\mathrm{A}} = \sum_{\vec{n}} \hbar(\omega_x n_x + \omega_y n_y + \omega_z n_z) a_{\vec{n}}^{+} a_{\vec{n}} \tag{14-183a}$$

$$H_{\mathrm{B}} = \int \mathrm{d}\vec{k}\varepsilon(\vec{k}) b^{+}(\vec{k}) b(\vec{k}) \tag{14-183b}$$

$$H_{\mathrm{AB}} = \sum_{\vec{m},\vec{m}'} \int \mathrm{d}\vec{k}\mathrm{d}\vec{k}' \gamma_{\vec{m},\vec{m}'}(\vec{k},\vec{k}') a_{\vec{m}}^{+} a_{\vec{m}'} b^{+}(\vec{k}) b(\vec{k}') \tag{14-183c}$$

$$\gamma_{\vec{m},\vec{m}'}(\vec{k},\vec{k}') = \frac{4\pi\hbar^2 a}{2\mu(2\pi)^3} \int \mathrm{d}\vec{r} \psi_{\vec{m}}^{*}(\vec{r}) \psi_{\vec{m}'}(\vec{r}) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}} \tag{14-183d}$$

其中，$a$ 为散射长度, $\mu = \dfrac{m_{\rm A}m_{\rm B}}{m_{\rm A}+m_{\rm B}}$ 为两种原子碰撞时的折合质量。

2) 量子主方程及平均场近似

(1) 量子主方程

由总系统的密度矩阵 $\rho_{\rm A+B}$ 满足的 von Neumann 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\rho_{\rm A+B}}{\mathrm{d}t} = [H, \rho_{\rm A+B}] \tag{14-184}$$

可得 A 类原子的约化密度矩阵 $\rho_{\rm A} = \mathrm{Tr}_{\rm B}\rho_{\rm A+B}$ 的量子主方程

$$\frac{\mathrm{d}\rho_{\rm A}}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}[H_{\rm A}, \rho_{\rm A}] + \hat{L}\rho_{\rm A} \tag{14-185}$$

其中刘维算子 $\hat{L}$ 定义为

$$\hat{L}\rho_A = \sum_{\vec{m}\neq\vec{n}} \varGamma_{\vec{n}\vec{m}}^{\vec{m}\vec{n}}(2a_{\vec{m}}^+ a_{\vec{n}}\rho_A a_{\vec{n}}^+ a_{\vec{m}} - a_{\vec{n}}^+ a_{\vec{m}} a_{\vec{m}}^+ a_{\vec{n}}\rho_A - \rho_A a_{\vec{n}}^+ a_m a_{\vec{m}}^+ a_{\vec{n}}) \tag{14-186a}$$

$$\varGamma_{\vec{n}\vec{m}}^{\vec{m}\vec{n}} = \frac{\pi}{\hbar}\int \mathrm{d}\vec{k}\mathrm{d}\vec{k}'\gamma_{nm}(\vec{k},\vec{k}')\gamma_{mn}(\vec{k}',\vec{k})n(\vec{k})[n(\vec{k})+1]\delta(\varepsilon(\vec{k})-\varepsilon(\vec{k}')+\alpha h\nu)$$

$$\alpha = \sum_{i=x,y,z}(n_i - m_i) \tag{14-186b}$$

推导式 (14-185) 时做了下述近似: ①二级微扰; ②$\rho_{\rm B}$ 处于热平衡; ③Markov 近似; ④$\rho_{\rm A+B}$ 的非对角元退相干。

(2) 平均场近似

在平均场近似下式 (14-186a) 变为

$$\begin{aligned}\hat{L}\rho_{\rm A} =& \sum_{\vec{m}} \varGamma_{\vec{m}}(2a_{\vec{m}}^+\rho_{\rm A}a_{\vec{m}} - a_{\vec{m}}^+a_{\vec{m}}\rho_{\rm A} - \rho_{\rm A}a_{\vec{m}}^+a_{\vec{m}} - \rho_{\rm A}) \\ &+ \sum_{\vec{m}} \varGamma^{\vec{m}}(2a_{\vec{m}}^+\rho_{\rm A}a_{\vec{m}} - a_{\vec{m}}^+a_{\vec{m}}\rho_{\rm A} - \rho_{\rm A}a_{\vec{m}}^+a_{\vec{m}} + \rho_{\rm A})\end{aligned} \tag{14-187}$$

其中，

$$\varGamma_{\vec{m}} = \sum_n \varGamma_{\vec{n}\vec{m}}^{\vec{m}\vec{n}} N_{\vec{n}}, \quad \varGamma^{\vec{m}} = \sum_n \varGamma_{\vec{n}\vec{m}}^{\vec{m}\vec{n}}(N_{\vec{n}}+1) \tag{14-188}$$

填充 $\psi_{\vec{n}}$ 态的平均原子数 $N_{\vec{n}}$ 定义为

$$N_{\vec{n}} = \mathrm{Tr}\rho_{\rm A}a_{\vec{n}}^+a_{\vec{n}} \tag{14-189}$$

3) 平均场近似下主方程的动力学代数结构与动力学对称性

在平均场近似下,

$$\rho_{\rm A} = \prod_{\vec{m}} \rho_{\vec{m}} \tag{14-190}$$

$\rho_{\vec{m}}$ 满足下述主方程

$$\frac{\mathrm{d}\rho_{\vec{m}}}{\mathrm{d}t} = \hat{\varGamma}_{\vec{m}}\rho_{\vec{m}} \tag{14-191}$$

其中，在 $\psi_{\bar{m}}$ 态空间的主方程, 它很像时间有关的 Hartree-Fock 方程 (TDHF), 是耦合的非线性的平均场方程。耗散算子 $\hat{\varGamma}_{\vec{m}}$ 对应于 TDHF 的 Hamilton 量, 它体现了平均场, 而 $\psi_{\vec{n}}$ 态的平均原子数 $N_{\vec{n}}$ 通过式 (14-188) 进入平均场, 把不同轨道的量子态耦合起来。因此, 方程 (14-191) 是量子多体问题中的 (TDHF) 平均场理论从量子力学向量子统计力学的推广。

利用由 $a_{\bar{m}}$ 和 $a_{\bar{m}}^{+}$ 的左右表示组成的复合表 $k_{\vec{m}}^{\nu}$[109]，耗散算子 (或衰变率算子) 的形式为

$$\hat{\varGamma}_{\vec{m}}=2\varGamma_{\vec{m}}K_{\vec{m}}^{+}+2\varGamma^{\vec{m}}K_{\vec{m}}^{-}-2(\varGamma_{\vec{m}}+\varGamma^{\vec{m}})K_{\vec{m}}^{0}-(\varGamma_{\vec{m}}-\varGamma^{\vec{m}}) \tag{14-192}$$

具有 su(1, 1) 动力学代数结构

$$[K_{\vec{m}}^{0},K_{\vec{m}}^{\pm}]=\pm K_{\vec{m}}^{\pm},\quad [K_{\vec{m}}^{-},K_{\vec{m}}^{+}]=2K_{\vec{m}}^{0} \tag{14-193}$$

按照代数动力学, 主方程 (14-191) 具有 su(1, 1) 动力学对称性 (有守恒量子数), 可以解析求解。

4) 平均场近似下量子主方程的代数动力学求解

(1) 静止稳态解

耗散算子的本征解

为了简便, 略去式 (14-191)∼ 式 (4-193) 的表示状态的下标。用代数动力学方法可求得式 (14-191)(略去下标 $m$)

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t}=\hat{\varGamma}\rho$$

的稳态解, 它们是下述本征方程的解

$$\hat{\varGamma}\rho^{n}=\gamma_{n}\rho^{n},\hat{\varGamma}=aK^{+}+bK^{-}-(a+b)K^{0}-(a-b)/2 \tag{14-194}$$

$$\rho^{n}=C_{n}\mathrm{e}^{\alpha_{+}K^{+}}\mathrm{e}^{\alpha_{-}K^{-}}|n\rangle\langle n| \tag{14-195}$$

$$\gamma_{\cdot n}=n(a-b)\leqslant 0,n=0,1,2,3,\cdots \tag{14-196}$$

$$\alpha_{+}=a/b,\quad \alpha_{-}=\frac{b}{a-b},\quad a=2\varGamma_{\vec{m}},\quad b=2\varGamma^{\vec{m}},\quad a\leqslant b \tag{14-197}$$

上述零本征值解是唯一的非简并的, 对应于平衡态, 本征值非负保证了系统长时间趋于平衡态。应当指出, 上述本征解是完备的, 它们与耗散算子的 Hermite 共轭 $\hat{\varGamma}^{+}$ 的本征解组成双正交系。

(2) 时间有关的解

方程 (14-191) 描述量子系统的非平衡演化过程, 可以用代数动力学方法求解, 结果如下

$$\rho(t)=C\exp\left[\int_{0}^{t}\mathrm{d}\tau(b(\tau)\alpha_{+}(\tau)-a(\tau))\right] \tag{14-198a}$$

$$\cdot\, \mathrm{e}^{\alpha_+(t)K^+}\sum_{N=0}^{\infty} f^N(t)\rho_N(0)\sum_{M=0}^{N}\begin{pmatrix} N \\ M \end{pmatrix}(\alpha_-(t))^{-M}|M\rangle\langle M|$$

$$f(t) = \alpha_- \exp\left[\int_0^t (2b\alpha_+ - a - b)\mathrm{d}\tau\right] \tag{14-198b}$$

$a, b$ 是时间的函数, $\alpha_+, \alpha_-$ 满足下述微分方程

$$\frac{\mathrm{d}\alpha_+}{\mathrm{d}t} = a + b\alpha_+ - (a+b)\alpha_-, \quad \frac{\mathrm{d}\alpha_-}{\mathrm{d}t} = b(1 - 2\alpha_+\alpha_-) + (a+b)\alpha_- \tag{14-199a}$$

5) 平衡态的唯一性与趋于平衡的必然性

从方程 (14-199a) 可知 $f(t)$ 的渐进行为

$$f(t) = \alpha_- \exp\left[\int_0^t (2b\alpha_+ - a - b)\mathrm{d}\tau\right] \xrightarrow{t\to\infty} \mathrm{const} \tag{14-199b}$$

和 $\alpha_-(t)$ 的渐进行为

$$\alpha_-(t) \xrightarrow{t\to\infty} \infty \tag{14-199c}$$

式 (14-199c)、式 (14-198a) 和式 (14-198b) 表明，任何非平衡统计态的解 $\rho(t)$ 都趋于唯一的平衡态

$$\rho(t\to\infty) \to C\mathrm{e}^{\frac{a}{b}K^+}|0\rangle\langle 0| = C\sum_{n=0}\frac{\left(\dfrac{a}{b}\right)^n}{n!}|n\rangle\langle n| \tag{14-200}$$

2. 二能级原子与环境热辐射场相互作用: 1-qubit 的耗散

系统的 Hamilton 量为

$$H = \frac{1}{2}\hbar\omega_0\sigma_z + \sum_k \hbar\omega_k b_k^+ b_k + \left[\sum_k g_k b_k \sigma_+ + H,C\right] \tag{14-201}$$

原子　　辐射场光子　　相互作用

其中，第一项是二能级原子的 Hamilton 量, 第二项是环境热辐射场 (光子) 的 Hamilton 量, 第三项是二者的相互作用。整个系统包括二能级原子中电子的自由度 (用 Pauli 矩阵 $\sigma_\nu(\nu = +, -, z)$ 表示) 和环境热辐射场光子的自由度 (用光子产生消灭算符 $b_k^+, b_k$ 表示)。在相互作用表象中考虑相互作用的二级微扰, 在 Markov 近似下, 得到原子的约化密度矩阵的主方程

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\rho(t)}{\mathrm{d}t} =& -\frac{\mathrm{i}}{2}\omega_0[\sigma_z,\rho] - \frac{\gamma}{2}(\bar{n}_0+1)(\sigma_+\sigma_-\rho + \rho\sigma_+\sigma_- - 2\sigma_-\rho\sigma_+) \\ & - \frac{\gamma}{2}\bar{n}_0(\sigma_-\sigma_+\rho + \rho\sigma_-\sigma_+ - 2\sigma_+\rho\sigma_-)\end{aligned} \tag{14-202}$$

$$\bar{n}_0 = 1/(\mathrm{e}^{\hbar\omega_0/kT} - 1), \quad \gamma = 2\pi\sum_k |g_k|^2\delta(\omega_k - \omega_0) \tag{14-203}$$

在量子通信与量子计算中, 二能级原子可以用做一个量子比特, 环境辐射与原子相互作用引起的耗散和退相干是必须考虑的问题。引进群的代数的左、右表示和复合表示, 可把具有三明治结构的量子主方程转变成 Schroedinger 型的方程, 这时原子的约化密度矩阵的主方程变为[110]

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} = \hat{\varGamma}(t)\rho \tag{14-204a}$$

其中耗散算子

$$\begin{aligned}\hat{\varGamma}(t) =& -\mathrm{i}\omega_0(t)\hat{U}_0 + \gamma(t)\bar{n}_0(t)\hat{J}_+ + \gamma(t)[\bar{n}_0(t)+1]\hat{J}_- \\ &-\frac{1}{2}\gamma(t)\hat{J}_0 - \frac{1}{2}\gamma(t)[2\bar{n}_0(t)+1]\end{aligned} \tag{14-204b}$$

是 $u(2)=\{\hat{U}_0,\hat{J}_0,\hat{J}_+,\hat{J}_-\}$ 代数的线性函数, 其中，

$$\hat{U}_0 = \frac{\sigma_z^r - \sigma_z^l}{2}, \quad \hat{J}_0 = \frac{\sigma_z^r + \sigma_z^l}{2}, \hat{J}_+ = \sigma_+^r\sigma_-^l, \quad \hat{J}_- = \sigma_-^r\sigma_+^l \tag{14-205}$$

$$[\hat{U}_0,\hat{J}_0] = [\hat{U}_0,\hat{J}_\pm] = 0, [\hat{J}_0,\hat{J}_\pm] = 2\hat{J}_\pm, \quad [\hat{J}_+,\hat{J}_-] = \hat{J}_0 \tag{14-206}$$

其中，Pauli 矩阵的右表示 $\sigma_\nu^r$ 作用在密度矩阵的左边, 左表示 $\sigma_\nu^l$ 作用在密度矩阵的右边, u(2) 代数 $\hat{J}_\alpha$ 是它们的复合表示。按照代数动力学, 上述主方程具有 u(2) 动力学对称性 (有守恒量子数), 是可积系统, 可以解析求解。文献 [110] 求得了它的包含唯一平衡态的静态本征解和必然趋于平衡态的时间有关的非平衡态解

$$\rho(t) \propto \mathrm{e}^{\hat{\varGamma}t}\rho(0) \to \rho_{eq} = \frac{1}{\bar{n}_0+1}|0\rangle\langle 0| + \frac{\bar{n}_0}{\bar{n}_0+1}|1\rangle\langle 1| \tag{14-207}$$

研究了一个量子比特的耗散问题。

3. 双微腔场与环境热辐射场相互作用: 2-qubit 的耗散与退相干

系统的 Hamilton 量为

$$H = \underbrace{\sum_{i=1,2}\hbar\omega_i a_i^+ a_i}_{\text{双腔子光子}} + \underbrace{\sum_k \hbar\omega_k b_k^+ b_k}_{\text{辐射场光子}} + \underbrace{\kappa\sum(b_k^+ a_k + b_k a_k^+)}_{\text{相互作用}} \tag{14-208}$$

双腔约化密度矩阵的主方程为

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} = \varGamma(t)\rho \tag{14-209}$$

其中耗散算子

$$\begin{aligned}\varGamma =& 2\left[\gamma_1\hat{K}_1^- + \gamma_2\hat{K}_2^- + \gamma_3\hat{K}_3^- + \gamma_3\hat{K}_4^- - \frac{g}{2}\left(\hat{J}_l^- + \hat{J}_l^+\right)\right. \\ &\left.-\frac{g^*}{2}\left(\hat{J}_r^- + \hat{J}_r^+\right) - \gamma_1\hat{K}_1^0 - \gamma_2\hat{K}_2^0 + \frac{\gamma_1+\gamma_2}{2}\right]\end{aligned} \tag{14-210}$$

是 4 个 su(1,1) 和 2 个 su(2) 代数的线性函数, 按照代数动力学, 上述主方程具有动力学对称性, 是可积系统, 可以解析求解。文献 [111] 已求得了它的包含唯一平衡态的静态本征解和时间有关的非平衡态解, 可用于研究两个量子比特的耗散与退相干问题。

4. 量子主方程的代数动力学解法的普遍性–量子统计系统的代数动力学

代数动力学是针对人造的非自治量子系统的求解问题而发展起来的, 并在这类量子系统中得到了成功的应用。上面的例子说明, 代数动力学方法不仅适用于量子力学系统, 而且也适用于量子统计力学的主方程的求解。上述这种推广, 导致量子统计系统的代数动力学。量子统计系统的这种代数动力学方法的优点是, 它能解决量子统计力学中非平衡态统计的一些困难而重要的问题: 如平衡态解的存在与唯一性, 任何非平衡态演化均趋于唯一的平衡态等问题。代数动力学对于它处理的问题, 不仅可提供平衡态和时间有关的统计态的解析解, 而且还提供了量子主方程的新信息, 如动力学对称, 统计解所具有的守恒量子数等。

量子统计系统的代数动力学特别适合处理量子系统的耗散与退相干。这种方法具有普遍性, 它正被用于处理更多的量子耗散与退相干问题, 上面介绍的二能级原子与热源相互作用, 二能级原子与单膜腔场和热源的相互作用 (与量子位的退相干有关), 腔场与经典场和热源的相互作用等是一些已经解决了的例子。

最近还把代数动力学用于推广的 Fokker-Planck 方程的求解, 研究股票市场的羊群效应与胖尾分布, 现简介如下。

5. Fokker-Planck 方程的代数结构: su(1,1) 非平衡耗散动力学

广义的 Fokker-Planck 方程为

$$\frac{\partial f(x,t)}{\partial t}=\Big[\underbrace{-\frac{\partial}{\partial x}A(t)x}_{\text{漂移项}}+\underbrace{B(t)\frac{\partial^2}{\partial x^2}}_{\text{扩散项}}\underbrace{+C(t)x^2}_{\text{关联项}}\Big]f(x,t)=\hat{\Gamma}(t)f(x,t) \tag{14-211}$$

引进 su(1,1) 生成元

$$\hat{k}_+=\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2},\hat{k}_0=-\frac{1}{4}\left(\frac{\partial}{\partial x}x+x\frac{\partial}{\partial x}\right),\hat{k}_-=-\frac{1}{2}x^2 \tag{14-212a}$$

满足

$$[\hat{k}_+,\hat{k}_-]=2\hat{k}_0,[\hat{k}_0,\hat{k}_\pm]=\pm\hat{k}_\pm \tag{14-212b}$$

耗散算子 $\hat{\Gamma}$ 可写成 su(1,1) 生成元的线性函数

$$\hat{\Gamma}(t)=2B(t)\hat{k}_++2A(t)\hat{k}_0-2C(t)\hat{k}_--\frac{A(t)}{2} \tag{14-213}$$

按照代数动力学, 上述主方程具有 $su(1,1)$ 动力学对称性, 是可积系统, 可以解析求解。已用代数动力学方法求得了它的解析解, 用于描写股票市场收益 $x$ 的概率

分布函数 $f(x,t)$ 的时间演化过程, 解释股票市场的羊群效应和收益 $x$ 的概率密度函数 $f(x,t)$ 的胖尾分布, 并找出了平衡态存在的条件, 证明了系统趋于平衡态的必然性[112]。

### 14.3.4　量子信息系统的研究

人类控制和利用微观粒子的实践叫 "量子工程"。当前量子工程的热点问题之一是量子通信和量子计算。而量子通信和量子计算的理论基础是量子信息论, 其要点如下[113-116]。

(1) 用具有两个状态的量子系统的任意叠加态做成一个量子比特去存储信息，用量子动力学演化去进行信息处理、加工与传递。这种基于量子态和量子力学运动规律的信息论叫做量子信息论, 它是量子力学和信息论的交叉与结合。

(2) 用宏观上非定域的、纠缠的量子态进行信息传递叫做量子通信。

(3) 用量子态荷载 (记载) 信息，把量子信息用符号表示，把量子信息源的符号集与编码符号集一一对应起来, 叫做量子编码; 把数量信息用量子态表示，通过量子态的量子力学演化，实现量子态所包含的数字信息的运算与加工，再从运算后的量子态中提取出运算后的数量信息结果, 叫做量子计算。

(4) 无论量子通信, 或是量子计算, 都基于多粒子系统量子态的叠加属性和纠缠属性。量子多体系统中粒子之间的相互作用和全同性原理, 会造成多粒子量子态之间的动力学关联与全同性关联。其结果是多粒子系统的量子态不可分解成单粒子量子态的乘积, 而形成若干个乘积态的线性叠加。多粒子系统量子态的上述叠加性质叫量子纠缠。环境的扰动或测量过程，会使多粒子量子态之间的纠缠和相干消失, 造成量子态退相干。量子纠缠, 特别是宏观尺度上的量子纠缠, 是量子论最神秘之处, 也是量子信息和量子通信的物理基础。而量子态退相干则是量子通信和量子计算必须克服的基本困难。

(5) 量子信息系统的两个基本子系统是量子信息储存系统和量子信息加工系统。量子信息储存系统的基本单元是量子位, 它是由一个具有两个状态的量子系统组成。量子信息加工系统的基本组件是量子逻辑门, 其中最基本的是一位量子通用门和两位量子控制非门，所有的逻辑门都可以由一位门和控制非门联合起来实现其操作功能。下面分别予以介绍。

#### 1. 自旋团簇量子位模型

考虑由三个自旋为 1/2 的粒子组成的各向异性团簇[113,114], 其 Heisenberg Hamilton 量为

$$\hat{H}_{\mathrm{clu}} = J(\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 + \hat{S}_2 \cdot \hat{S}_3 + k\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_3) = \frac{J}{2}\left(\hat{S}^2 - \frac{9}{4}\right) + \frac{J(k-1)}{2}\left(\hat{S}_{13}^2 - \frac{3}{2}\right) \tag{14-214}$$

若只考虑近邻相互作用 ($k=0$), 则 Hamilton 量可写为

$$\hat{H}_{\mathrm{clu}}=\frac{J}{2}\left(\hat{S}^2-\hat{S}_{13}^2-\frac{3}{4}\right) \tag{14-215}$$

总自旋定义为 $\hat{S}=\sum_{i=1}^{3}\hat{S}_i,\ \hat{S}_\alpha=\sum_j\hat{S}_{j,\alpha},\ (\alpha=x,y,z)$ 。由于 $\hat{S}^2,\hat{S}_{13}^2,\hat{S}_z,\hat{H}_{\mathrm{clu}}$ 彼此之间对易, 故能量本征态可以用 $\hat{S}^2$, $\hat{S}_z$ 和 $\hat{S}_{13}^2$ 的本征值 $S(S+1)$,$S_z$ 和 $S_{13}(S_{13}+1)$ 标志。Hamilton 量 (14-214) 和 Hamilton 量 (14-215) 可用代数动力学方法求得解析解, 其本征能量为

$$E_{\mathrm{clu}}(S,S_{13})=\frac{J}{2}\left[S(S+1)-S_{13}(S_{13}+1)-\frac{3}{4}\right] \tag{14-216}$$

对于奇数粒子系统, 按角动量耦合规则, 最小总自旋为 $S=1/2$。由此求得能量最低的基态为下述二重简并态

$$|0\rangle=|\uparrow\rangle=\psi(\frac{1}{2},1,\frac{1}{2})=\frac{1}{\sqrt{6}}\left(2|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle-|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle-|\downarrow\uparrow\uparrow\rangle\right),\quad \hat{S}_z|0\rangle=(\hbar/2)|0\rangle \tag{14-217a}$$

$$|1\rangle=|\downarrow\rangle=\psi(\frac{1}{2},1,-\frac{1}{2})=\frac{1}{\sqrt{6}}\left(2|\downarrow\uparrow\downarrow\rangle-|\downarrow\downarrow\uparrow\rangle-|\uparrow\downarrow\downarrow\rangle\right),\quad \hat{S}_z|1\rangle=-(\hbar/2)|1\rangle \tag{14-217b}$$

基态能量为

$$E_{\mathrm{clu}}=\left(\frac{1}{2},1\right)=\frac{J}{2}\left[S(S+1)-S_{13}(S_{13}+1)-\frac{3}{4}\right]=-J \tag{14-218}$$

第一激发态能量为

$$E_{\mathrm{clu}}\left(\frac{1}{2},0\right)=\frac{J}{2}\left[S(S+1)-S_{13}(S_{13}+1)-\frac{3}{4}\right]=0 \tag{14-219}$$

相应的波函数也可求出。第一激发态与基态之间的能隙为 $\Delta=J$。

若施加一个沿 $z$ 轴的外磁场 B 后, 其 Hamilton 量为

$$\hat{H}=\hat{H}_{\mathrm{clu}}+g\mu_{\mathrm{B}}B(t)\cdot\hat{S} \tag{14-220}$$

由于上式中的 Zeeman 项与 $\hat{H}_{\mathrm{clu}}$ 对易, $\hat{H}_{\mathrm{clu}}$ 的每个不可约子空间是动力学独立不变的, 分别在各自的子空间内演化。这时, 基态 (14-217) 成为二能级系统, $|1\rangle$ 的 Zeeman 能较低。调节参数使 $\Delta\gg g\mu_{\mathrm{B}}B$, 则 $\hat{H}_{\mathrm{clu}}$ 的激发态不会被引起二能级跃迁的外加信号激发, 二能级基态子空间 (14-217) 将保持其独立不变性, 因此可以做成一个二能级量子位。

可以证明, 三粒子团簇的基态二能级系统 (14-217), 由于集体关联效应, 比起由一个自旋为 1/2 的单个粒子做成的量子位有更强的抗退相干能力[113]。

2. 一位通用量子位逻辑门

对由三个自旋为 1/2 粒子组成的各向异性 Heisenberg 自旋团簇，施加一个时间有关的磁场中，系统 Hamilton 量变为

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{clu}} + g\mu_{\text{B}} B(t) \cdot \sum_{i=1}^{3} \hat{S}_i \tag{14-221}$$

这时的系统是一个典型的非自治量子系统。由于 Zeeman 能级劈裂，除了 $S_z$ 随时间变化之外，基态子空间和激发态子空间的时间演化都是相互独立的、不变的。通过调整物理参数 ($g$ 因子和外磁场) 可以使激发态子空间远离基态子空间，使得自旋团簇的这个基态二能级子空间是一个较好的近似不变子空间[115,116]。

接下来，我们用代数动力学方法求解含时 Schroedinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi = \hat{H}(t)\psi \tag{14-222}$$

引入规范变换

$$\begin{aligned} &\bar{\psi}(t) = U_g^{-1}\psi(t) \\ &U_g = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda(t)\hat{S}_y} \end{aligned} \tag{14-223}$$

经过规范变化后的波函数满足协变的 Schroedinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t}\bar{\psi} = \hat{\bar{H}}(t)\bar{\psi} \tag{14-224}$$

利用恒等关系式

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda(t)\hat{S}_i}\hat{S}_j \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda(t)\hat{S}_i} = \hat{S}_j \cos\lambda(t) + \varepsilon_{ijk}\hat{S}_k \sin\lambda(t) \tag{14-225}$$

得到规范变化后的 Hamilton 量

$$\begin{aligned} \hat{\bar{H}}(t) =& U_g^{-1}\hat{H}(t)U_g - \mathrm{i}U_g^{-1}\frac{\partial}{\partial t}U_g \\ =& \hat{H}_{\text{clu}} + (g\mu_{\text{B}}B_x\cos\lambda(t) + g\mu_{\text{B}}B_z\sin\lambda(t))\hat{S}_x + (g\mu_B B_y + \dot{\lambda}(t))\hat{S}_y \\ &+ (g\mu_{\text{B}}B_z\cos\lambda(t) - g\mu_{\text{B}}B_x\sin\lambda(t))\hat{S}_z \end{aligned} \tag{14-226}$$

如果 $B(t)$ 和 $\lambda(t)$ 满足下面条件：

$$\begin{aligned} &B_x(t) = B_0 \sin\omega t \\ &B_y(t) = \frac{\omega}{g\mu_{\text{B}}} \\ &B_z(t) = B_0\cos\omega t \\ &\lambda(t) = -\omega t \end{aligned} \tag{14-227}$$

规范变换后的 Hamilton 量 $\overline{H}(t)$ 可以简化为

$$\hat{\bar{H}}(t) = \hat{H}_{\text{clu}} + g\mu_{\text{B}}B_0\hat{S}_z = \hat{H}_{\text{clu}} + \hbar\omega_0\hat{S}_z \tag{14-228}$$

这里 $\omega_0 = \dfrac{g\mu_{\text{B}}B_0}{\hbar}$。利用初始条件

$$\bar{\psi}(0) = \psi(0) = \alpha\,|0\rangle + \beta|\,1\rangle \tag{14-229}$$

得到协变的 Schroedinger 方程的解为

$$\bar{\psi}(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}Jt/\hbar}\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t/2}\alpha\left|0\right\rangle + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t/2}\beta\left|\,1\right\rangle\right) \tag{14-230}$$

在通过逆变换得到原 Schroedinger 方程的解为

$$\begin{aligned}\psi(t) =& \hat{U}_g\bar{\psi}(t)\\ =& \mathrm{e}^{\mathrm{i}Jt/\hbar}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t\hat{S}_y}\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t/2}\alpha\left|0\right\rangle + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t/2}\beta\left|\,1\right\rangle\right) = \hat{U}(t)\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix}\end{aligned} \tag{14-231}$$

时间演化算符的矩阵表示为

$$\hat{U}(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}Jt/\hbar}\begin{bmatrix}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t/2}\cos(\omega t/2) & -\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t/2}\sin(\omega t/2)\\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t/2}\sin(\omega t/2) & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t/2}\cos(\omega t/2)\end{bmatrix} \tag{14-232}$$

这就是一位通用量子门。通过调节物理参数，可以实现任何一种一位量子位逻辑门。

3. 两位量子控制非门

考虑两个自旋为 1/2 的团簇系统[115,116]，在三段时间间隔内，施加不同的外磁场。该非自治系统的 Hamilton 为

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_1\theta(t-0)\theta(t_1-t) + \hat{H}_2\theta(t-t_1)(t_2-t) + \hat{H}_3\theta(t-t_2) \tag{14-233}$$

$$\hat{H}_1 = -\mu_{\text{B}}B_1\sigma_y^2 \tag{14-234a}$$

$$\hat{H}_2 = J\sigma_z^1\sigma_z^2 + \mu_{\text{B}}B_2\sigma_z^1 + \mu_{\text{B}}B_2\sigma_z^2 + K \tag{14-234b}$$

$$\hat{H}_3 = \mu_{\text{B}}B_3\sigma_y^2 \tag{14-234c}$$

其中 $\hat{H}_1, \hat{H}_2, \hat{H}_3$ 为相应的时间段内的系统的 Hamilton 量，$\hat{H}_2$ 是对两个粒子系统进行整体操作的 Hamilton 量，$\hat{H}_1, \hat{H}_3$ 是对粒子 2 进行的局域操作的 Hamilton 量。$J$ 是二粒子之间的可调耦合常数，$K$ 是常量，$B_1, B_2$ 和 $B_3$ 是所施加的外磁场强度，$\mu_{\text{B}}$ 是 Bohr 磁子，$\sigma_{x,y,z}^i(i=1,2)$ 是团簇 $i$ 对应的 Pauli 自旋矩阵，$\theta$ 为阶梯函数。

当对系统施加随时间变化的外磁场时，Hamilton 量依赖时间，现用代数动力学求解时间有关的 Schroedinger 方程。

(1) 在时间间隔 $t \in [0, t_1]$ 内, 系统的 Hamilton 量可写为

$$\hat{H}_1 = -\mu_{\mathrm{B}} B_1 \sigma_y^2 \tag{14-235}$$

求解 Schroedinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial \psi_1(t)}{\partial t} = \hat{H}_1 \psi_1(t), \tag{14-236}$$

可以得到系统的波函数

$$\psi_1(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mu_{\mathrm{B}} B_1 \sigma_y^2 t/\hbar} \psi(0) = \hat{U}_1(t)\psi(0), \tag{14-237}$$

其中系统的初态为

$$\psi(0) = \alpha|\uparrow\uparrow\rangle + \beta|\uparrow\downarrow\rangle + \gamma|\downarrow\uparrow\rangle + \delta|\downarrow\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \\ \delta \end{pmatrix} \tag{14-238}$$

第一个时间段内态的演化算子的矩阵表示为

$$\hat{U}_1(t) = \begin{bmatrix} \cos(\mu_{\mathrm{B}} B_1 t/\hbar) & \sin(\mu_{\mathrm{B}} B_1 t/\hbar) & 0 & 0 \\ -\sin(\mu_{\mathrm{B}} B_1 t/\hbar) & \cos(\mu_{\mathrm{B}} B_1 t/\hbar) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos(\mu_{\mathrm{B}} B_1 t/\hbar) & \sin(\mu_{\mathrm{B}} B_1 t/\hbar) \\ 0 & 0 & -\sin(\mu_{\mathrm{B}} B_1 t/\hbar) & \cos(\mu_{\mathrm{B}} B_1 t/\hbar) \end{bmatrix}. \tag{14-239}$$

(2) 在时间 $t \in [t_1, t_2]$ 内，系统的 Hamilton 量为

$$\hat{H}_2 = J\sigma_z^1 \sigma_z^2 + \mu_{\mathrm{B}} B_2 \sigma_z^1 + \mu_{\mathrm{B}} B_2 \sigma_z^2 + K \tag{14-240}$$

求解相应的 Schroedinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial \psi_2(t)}{\partial t} = \hat{H}_2 \psi_2(t) \tag{14-241}$$

得

$$\psi_2(t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(J\sigma_z^1\sigma_z^2 + \mu_{\mathrm{B}} B_2 \sigma_z^1 + \mu_{\mathrm{B}} B_2 \sigma_z^2 + K)(t-t_1)/\hbar} \psi_2(0) = \hat{U}_2(t)\psi_2(0) \tag{14-242}$$

其中

$$\psi_2(0) = \psi_1(t_1) \tag{14-243}$$

相应的时间演化算子为

$$\hat{U}_2(t)$$
$$= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(J\sigma_z^1\sigma_z^2 + \mu_{\mathrm{B}} B_2 \sigma_z^1 + \mu_{\mathrm{B}} B_2 \sigma_z^2 + K)(t-t_1)/\hbar}$$

$$=\begin{bmatrix} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(J+2\mu_{\mathrm{B}}B_2+K)(t-t_1)/\hbar} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(-J+K)(t-t_1)/\hbar} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(-J+K)(t-t_1)/\hbar} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(J-2\mu_{\mathrm{B}}B_2+K)(t-t_1)/\hbar} \end{bmatrix} \tag{14-244}$$

(3) 在时间 $t \in [t_2, t_3]$ 内，系统的 Hamilton 量为

$$\hat{H}_3(t) = \mu_{\mathrm{B}} B_3 \sigma_y^2 \tag{14-245}$$

Schroedinger 方程的解为

$$\psi_3(t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mu_{\mathrm{B}} B_3 \sigma_y^2 (t-t_2)/\hbar} \psi_3(0) = \hat{U}_3(t)\psi_3(0) \tag{14-246}$$

其中

$$\psi_3(0) = \psi_2(t_2) \tag{14-247}$$

时间演化算子为

$$\hat{U}_3(t) = \begin{bmatrix} \cos(\mu_{\mathrm{B}}B_3(t-t_2)/\hbar) & -\sin(\mu_{\mathrm{B}}B_3(t-t_2)/\hbar) & 0 & 0 \\ \sin(\mu_{\mathrm{B}}B_3(t-t_2)/\hbar) & \cos(\mu_{\mathrm{B}}B_3(t-t_2)/\hbar) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos(\mu_{\mathrm{B}}B_3(t-t_2)/\hbar) & -\sin(\mu_{\mathrm{B}}B_3(t-t_2)/\hbar) \\ 0 & 0 & \sin(\mu_{\mathrm{B}}B_3(t-t_2)/\hbar) & \cos(\mu_{\mathrm{B}}B_3(t-t_2)/\hbar) \end{bmatrix} \tag{14-248}$$

二团簇系统的波函数经过 Hamilton 量的三次动力学演化，从初态演化到了末态，可表达为

$$\psi(t) = \hat{U}(t)\psi(0) \tag{14-249}$$

总的时间演化算子为

$$\hat{U}(t) = \hat{U}_3(t)\hat{U}_2(t_2)\hat{U}_1(t_1) = \begin{bmatrix} AC_1C_2+BS_1S_2 & AS_1C_2-BC_1S_2 & 0 & 0 \\ AC_1S_2-BS_1C_2 & AS_1S_2+BC_1C_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & BC_1C_2+CS_1S_2 & BS_1C_2-CC_1S_2 \\ 0 & 0 & BC_1S_2-CS_1C_2 & BS_1S_2+CC_1C_2 \end{bmatrix} \tag{14-250}$$

其中，

$$A = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(J+2\mu_{\mathrm{B}}B_2+K)(t_2-t_1)/\hbar}$$

$$B = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(-J+K)(t_2-t_1)/\hbar}$$

$$C = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(J-2\mu_{\mathrm{B}}B_2+K)(t_2-t_1)/\hbar}$$
$$C_1 = \cos(\mu_{\mathrm{B}}B_1t_1/\hbar), S_1 = \sin(\mu_{\mathrm{B}}B_1t_1/\hbar)$$
$$C_2 = \cos(\mu_{\mathrm{B}}B_3(t-t_2)/\hbar), S_2 = \sin(\mu_{\mathrm{B}}B_3(t-t_2)/\hbar) \tag{14-251}$$

调节上述物理参数, 使得在相应的时间内满足下面的条件：

$$\mu_{\mathrm{B}}B_1t_1/\hbar = \frac{\pi}{4}, J(t_2-t_1)/\hbar = \frac{19\pi}{4}$$
$$\mu_{\mathrm{B}}B_2(t_2-t_1)/\hbar = \frac{5\pi}{4}, K(t_2-t_1)/\hbar = \frac{3\pi}{4}, \mu_{\mathrm{B}}B_3(t_3-t_2)/\hbar = \frac{\pi}{4} \tag{14-252}$$

就可以实现了两量子比特的控制非门的逻辑操作，其矩阵表示为

$$U = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} = C_{\mathrm{not}} \tag{14-253}$$

因此，经过三次拓扑结构不同的 Hamilton 量的动力学时间演化，适当调节物理参数，就可以实现两量子比特的控制非门操作。

## 14.4 讨论与展望

### 14.4.1 人造量子系统问题

人造量子系统包括一大类量子系统，而非自治量子系统只是其中的一类。即使是非自治量子系统，具有明确的动力学代数结构的也只是一小部分，有些非自治量子系统的代数结构不明确或根本没有有限维代数结构。因此，寻找非自治量子系统的代数结构本身就是一个重要的研究课题。只有这一问题解决了，才能用代数动力学方法求解。对于不具有有限维李代数结构的非自治量子系统的求解问题，是一个有待研究的重要课题。

还有些人造量子系统存在量子点、量子线和人造的奇异边界条件，甚至粒子在弯曲的空间中运动。对这类人造量子系统，存在着奇异和弯曲流形中的量子化问题和量子运动方程求解问题。这对于传统的量子力学是一个挑战，需要进行基本性的研究。

此外，还有一些人造量子系统，实验上做出来了，但很难写出系统的 Hamilton 量和边界条件。对于这类人造量子系统的 Hamilton 量的构造、求解问题的正确陈述以及运动方程的数值模拟是一个密切联系实际的基础理论问题。

### 14.4.2　代数动力学方法与其他相关方法的比较

求解非自治系统量子力学问题的方法较多，但比较流行的方法除了代数动力学，还有 Lewis 等[117] 的不变算子方法和 Wei 等[118] 的时间演化算子方法。为了比较，我们把前者称为 L-R 方法，后者称为 W-N 方法，把代数动力学称为 A-D 方法。下面的比较主要是针对它们对线性系统的处理。代数动力学 (A-D) 方法的优点：①能有效地揭示和研究非自治系统的非平凡的时间有关的动力学对称性并在求解时充分利用这种对称性；②运用规范变换可以方便地求得系统在各种可能的表象中的解析解；③把量子解所需要的参数函数的数目减到最小 (等于代数的阶与秩之差 $n-l$)；④能自动给出非线性变换，把规范变换的参数所满足的非线性运动方程转化成 Cartan 算子的系数所满足的线性运动方程；⑤能清晰地建立起量子–经典对应，给出从经典解构造量子解的方法与步骤。

与 L-R 方法相比，代数动力学推广了 L-R 方法，从一个不变算子的理论推广到多个完备可互易算子集 (CSCOII) 的理论。由于这种推广，代数动力学成为揭示非自治系统的时间有关的动力学对称性的理论。而且代数动力学还系统地研究了非自治量子系统的规范不变性和规范自由度问题。对多自由度系统引进了动力学非绝热基矢的概念，对线性系统建立起漂亮的量子–经典对应。上述各点，都是代数动力学超越 L-R 的地方。

与 W-N 方法相比，代数动力学把 W-N 方法作为规范变换后的 Hamilton 量为零的极限情况包含于其中。由于 W-N 方法中，规范变换后的 Hamilton 量为零，它既失去了规范自由度，又丧失了对非平凡的时间有关的动力学对性的研究的可能性。W-N 方法中, 时间演算子包含的参数可以多至李代数的阶 $n$，显然比代数动力学所需的参数 $(n-l)$ 多。由于 W-N 方法不能讨论时间有关的动力学对称性和研究 Cartan 算子的运动方程，它也失去了把演化算子的参数的非线性运动方程线性化的机会，并因此丧失了建立起量子–经典对应的可能性。

表 14-3 列举出三种方法在处理各项问题上的比较。该方法能处理的问题以“√”表示，处理了一部分的用“√?”表示，不能处理的用“×”表示，不明确的用“?”表示。

**表 14-3　代数动力学与 L-R 和 W-N 方法的比较**

| 方法名称 | 系统 | | 参数方程 | | 不变算子集 | | 动力学对称性 | 规范不变性与规范自由度 | 量子 - 经典对应 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | 线性 | 非线性 | 个数 | 线性化 | 个数 | CSOLL | | | |
| A-D | √ | √? | $n-l$ | √ | 多个 | √ | √ | √ | √ |
| L-R | √ | × | $\geqslant(n-l)$? | | 1 个 | × | ? | × | × |
| W-N | √ | × | $n$ | × | × | × | × | × | × |

### 14.4.3 展望

人造量子系统的问题已在 14.4.1 小节中讨论了，本小节讨论一下代数动力学本身的问题及其发展前景。

代数动力学的物理基础是来自真空和相互作用的对称性, 使量子系统的 Hamilton 量具有对称性代数结构, 进而导致的量子对称运动模式, 需要用代数动力学理论方法加以处理。

目前，代数动力学处理的问题基本上是线性系统和可线性化的非线性系统。对于一般的非线性系统，如何有效地运用代数动力学方法，是一个今后要解决的问题。对非线性动力系统，如何把非线性李代数的最新成果，如量子代数和 Yangian 方面的成果，运用到代数动力学中去，也是一个很有意义的课题。

另外，目前研究的代数动力系统，其动力学群是整体的。如何把代数动力学方法推广到局域的代数系统，如场论中的局域代数动力系统以及固体物理中的点阵代数 (如 Heisenberg 模型的 su(2) 点阵代数) 动力系统，这是另一个十分有意义的课题。

总之，代数动力学是针对非自治量子系统中的对称性运动模式求解的需要而发展起来的理论方法。从理论上说，代数动力学把量子力学理论形式从通常的 Heisenberg 代数动力学形式推广到一般的李代数动力学形式。它继承和发展了 Dirac-Heisenberg 关于量子力学是 Hilbert 空间的算子随时间演化的动力学的思想，明确地把量子力学看成是 Hilbert 空间的量子运动学代数在系统的 Hamilton 量趋动下的代数动力学。代数动力学吸收和推广了核物理中的动力学对称性理论成果，引进了量子场论中规范变换和规范自由度的思想，把微分几何中的活动标架和核物理中的非绝热基矢的概念发展成为动力学基矢的概念，使之成为非自治系统量子力学中的新颖而有效的理论方法。代数动力学还需要发展，克服自身的局限性，在更广范的应用中不断完善起来。

## 14.5 非线性微分方程的代数动力学算法

王顺金、张华和卢伟涛等把代数动力学用于非线性常微分和偏微分物理演化方程的数值求解[120-128]，建立了代数动力学算法。要点如下：

(1) 代数动力学算法是从理论物理研究中发展出来的一种物理算法，它充分利用动力学系统的对称性和守恒律，尽可能把系统的物理规律和物理状态的信息纳入算法设计，利用对称性和守恒律来抑制误差积累，使数值计算更好地模拟物理演化过程，从而提高精度和稳定性。代数动力学算法注重算法对物理系统数值求解的精确性和有效性，并未深究算法理论问题，而对这些问题的研究，需要数学家的帮

助才有可能解决。

(2) 运用泛函分析和量子场论中的泛函微分技术，把代数动力学算法推广用于非线性偏微分演化方程的数值求解。对 Burgers 方程和 Advection 方程的数值求解的计算机实验表明，它比现有几种算法有更高的精度和稳定性。张华已把它用于九院九所工程物理偏微分演化方程数值求解。东北石油大学刘成仕改进和简化了非线性偏微分演化方程解法中 Taylor 级数系数函数的计算[128]。

(3) 代数动力学算法在算法设计上，不同于 “龙格–库塔算法” 和 “辛几何算法”，它强调动力学系统的对称性和守恒律并用于算法设计。大量的计算机实验表明，与其他算法相比在阶数相同的情况下，代数动力学算法有更高的精度和稳定性。

(4) 代数动力学算法尚不完善，算法的数学理论基础尚需澄清，这需要大量科学、工程实际计算问题的进一步检验和数学家的帮助以提高该算法的数学理论。

有兴趣的读者可参考文献 [120–128]。

## 14.6 致 谢

本章是在文献 [119] 的基础之上，经过仔细修改和扩充写成的，作者感谢冯端教授鼓励和敦促作者写成该论文。作者还感谢他的合作者 Weiguny、Weidenmueller、李福利、左维、揭泉林、韦联福、岑理相、安均鸿、侯邦品等教授和应祖建、王鹏、陶军、贾文志、霍建立、张华、卢伟涛等博士。没有他们的长期合作，代数动力学及其应用不可能有现在这样丰富的内容。作者也感谢徐躬耦、杨立铭、吴式枢等教授与作者的多次有益的讨论。这项工作得到国家自然科学基金、教育部博士点基金、兰州重离子加速器国家实验室原子核理论中心科学基金的长期支持，作者在此表示感谢。

## 参 考 文 献

[1] Binnig G, Rohrer H. Rev Mod Phys, 1987, 59: 615–625.

[2] Paul W. Rev Mod Phys, 1990, 62: 531–540.

[3] Chu S, Bjorkholm J E, Ashkin A, et al. Phys Rev Lett, 1986, 57: 314–317;
Raab A, Prentiss M, Cable A, et al. Phys Rev Lett, 1987, 59: 2631–2634;
Davis K B, Mewes MO, Andrews M R, et al. Phys Rev Lett, 1995, 75: 3969–3973.

[4] Hinds E A. Cavity Quantum Electrodynamics Bates D, Bederson B ed. Advances in Atomic, Molecular and Optical Physics. New York: Academic, 1991;
Shore B W, Knight P L. J Mod Optics, 1993, 40(7): 1195–1238.

[5] 闫守胜，甘子钊. 介观物理. 北京: 北京大学出版社，1995;
周义昌，李华钟. 物理学进展, 1993, 13(3): 423–440.
[6] Deutsch D, Proc R Soc, 1985, A400: 97–117; 1989, A425: 73–90;
Ekert A, Tozsa R. Rev Mod Phys, 1996, 68(3): 733–753;
Shor P W. in Proc. of the 35th Symposium on Foundation of Computing Sciences. Goldwasser S. ed. Los Alamitos: IEEE Computer Society, 1994: 124.
[7] Brown L S. Phys Rev Lett, 1991, 66: 527–529.
[8] Cheng C M, Fung P C W. J Phys, 1988, A21: 4115–4131.
[9] Morales D A. J Phys 1988, A21: L889–892.
[10] Ph.de Sousa Gerbert. Ann Phys, 1989, 189: 155–173.
[11] Bose S K, Dutta-Roy B. Phys Rev, 1991, A43: 3217–3220.
[12] Bittrich W, Reuter M. Phys Lett, 1991, A155: 94–98.
[13] Boskoutas S, Jannussis A, Miggnani R. Phys Lett, 1992, A164: 17–22.
[14] Li F L, Wang S J, Weiguny A, et al. J Phys, 1994, A27: 985–992.
[15] Wang S J, Zuo W, Weiguny A, et al. Phys Lett, 1994, A196: 7–12; 物理学报, 1995, 44(8): 1184–1191.
[16] Wang S J, Zuo W. Phys Lett, 1994, A196: 13–17; 物理学报, 1995, 44(8): 1177–1183.
[17] Jaynes E T, Cummings F W. Proc, 1963, 51: 89.
[18] Yoo H L, Eberly J H. Phys Rep, 1985, 118: 239–337.
[19] Shore B W, Knight P L. J Mod Optics, 1993, 40(7): 1195–1328.
[20] Jie Q L, Wang S J, Wei L F. J Phys, 1997, A30: 6147–6154.
[21] Wang S J. Phys Rev, 1990, A42: 5107–5110.
[22] Wang S J. Z Phys, 1994, B96: 97–103.
[23] Abdalla M S. Phys Rev, 1991, A44: 2040–2047.
[24] Baseia B, Mizrahi S S, Moussa M H Y. Phys Rev, 1992, A46: 5885–5889.
[25] Ying Z J, Wang S J, Zhang C H, Chin Phys Lett, 1999, 16(6): 391–393.
[26] Negele J W. Rev Mod Phys, 1982, 54: 913–1015.
[27] 张文忠，王顺金. 物理学报，1997, 46(2): 209–226.
[28] Wang S J, Li F L, Weiguny A. Phys Lett, 1993, A180: 189–196.
[29] Wang S J, Jie Q L. Algebraic dynamics and its applications in physics, in Proc. of the 21st-22nd Hopkins Symposium on Particle Physics and Field Theory, Singapore: World Scientific, 1999.
[30] Bohm A, Ne'eman Y, Barut A. Dynamical Groups and Spectrum Generating Algebras, Singapore: World Scientific, 1988.
[31] Elliott J P. Proc R Soc. 1958, A245: 1254.
[32] Gell-Mann M, Ne'eman Y. The Eightfold Way. New York: Benjamin, 1964.
[33] Arima A, Iachello F. Phys Rev. Lett, 1975, 35: 1069–1072; Ann Phys, 1976, 99: 253–319; 1978, 111: 201–238; 1978, 115: 325–366; 1979, 123: 468–492.

[34] Corwell J F. Group Theory in Physics I. London: Academic, 1984;
Cho Y M. Proc. of the 14$^{th}$International Colloquium on Group Theoretical Method In Physics. Singapore: World Scientific, 1986.

[35] Dattoli G, Gallardo J C, Torre A. La Rivista Del Nuovo Cimento11. 1988: 3(11): 1–79.

[36] Li F L, Lin D L, George F, et al. Phys Rev, 1989, A40(3): 1394–1401;
Li F L, Li X S, Lin D L , et al. Phys Rev, 1989, A40: 5129–5134; Phys Rev. 1990, A41: 2712–2717.

[37] Drinfel'd V G. Quantum Group, in Proc. of the International Conference of Mathematics, 1986, Berkeley. 中译本见《数学译林》, 1991, 10, No.1–2, 101, 185.

[38] Drinfel'd V G, Hopf Algebras and the Quantum Yang-Baxter Equation. Soviet Math Dokl, 1985, 32(1): 254.

[39] 马中骐. 杨–巴克斯特方程和量子包络代数. 北京：科学出版社，1993;
葛墨林, 薛康, 量子力学中的杨–巴克斯特方程. 上海: 上海科学教育出版社, 1998.

[40] Goldstein H. Classical Mechanics, 2nd ed. MA: Andison-Wesley, 1980.

[41] Dirac P A M. Principle of Quantum Mechanics. 4th ed. Oxford: Clarendon, 1958.

[42] Wybourne B G. Classical Groups For Physicists. New York: Wiley, 1974.

[43] Chen J Q. Group Representation Theory For Physicists. Singapore: World Scientific, 1988.

[44] Zhang V M, Feng D H, Yuan J M, et al. Phys Rev, 1989, A40(1): 438–447;
Zhang W M, Feng D H, Gilmore R. Rev Mod Phys, 1990, 62: 867–927.

[45] Ayik S. Noerenberg W. Z Phys, 1982, A309: 121–134.

[46] Berry M V. Proc R Soc, London, 1984, A392: 51–57.

[47] Simon B. Phys Rev Lett, 1983, 51: 2167–2170.

[48] Wilczek F, Zee A. Phys Rev Lett, 1984, 52: 2111–2114.

[49] Aharonov Y, Anadan J. Phys Rev Lett, 1987, 58: 1593–1596.

[50] 戴元本. 相互作用的规范理论. 北京：科学出版社，1987.

[51] 左维，王顺金. 物理学报，1995, 44(9): 1353–1362；
Zuo W, Wang S J. J Phys. I France, 1997, 7: 749–758.

[52] Tartaglia A, Lett. Nuovo Cimento , 1977, 19: 205–209.

[53] Khandekar D C, Lawande S V. J Math Phys, 1979, 20: 1870–1877.

[54] Dodonov V V, Man'ko V I. Phys Rev, 1979, A20: 550–560.

[55] Chen B K. Phys Lett, 1985, A113: 293–296.

[56] Ben-Aryeh Y, Mann A. Phys Rev Lett, 1985, 54: 1020–1022.

[57] 左维，王顺金. 物理学报，1995, 44(9): 1364–1372;
Zuo W, Wang S J. Helv Phys Acta, 1997, 70: 578–589.

[58] Stenholm S. Foundation of Laser Spectroscopy. New York: Wiley, 1984.

[59] Margcuse M. Engineering Quantum Electrodynamics. New York: Academic Press, 1981.

[60] Eberly J H, Labropoulos P. Multiphoton Processes Proceedings of the International Conference at the University of Rochester. New York: Wiley, 1977.
[61] Jie Q L, Wang S J, Wei L F. J Phys, 1997, A 30: 2077–2084;
揭泉林, 王顺金, 韦联福. 高能物理与核物理 1998, 22(2): 111–116.
[62] Jie Q L, Wang S J, Wei L F. Commun Theor Phys, 1999, 31(1): 107–112.
[63] Wang S J. Phys Rev, 1990, A42(9): 5103–5106.
[64] Wang S J, Cen L X. Phys Rev, 1998, A58(4): 3328–3330.
[65] Feynman R P, Vernon F L, Hellwarth R W. J Appl Phys, 1957, 28: 49–52.
[66] Feynman R P, Leighton R S, Sands M. The Feynman Lectures in Physics. Ш.MA: Addison-Wesley, 1965.
[67] Fano U. Rev Mod Phys, 1983, 55: 855–874.
[68] Cen L X, Wang S J, Ying Z J, et al. Phys Lett, 1999, A 256: 329–332.
[69] Lehmberg R H. Phys Rev, 1970, A 2: 883–888, 889–896.
[70] Rudolph T G, Ficek Z, Dalton B J. Phys Rev, 1995, A 52: 636–656.
[71] Cen L X, Wang S J. Canonical transformation for three-level system of V configuration and its non-decaying state. Phys Lett, 1999, A 261: 51–56.
[72] Zhu S Y, Scully M O. Phys Rev Lett, 1996, 76: 388–391.
Huang H, Zhu S Y, Zubairy M S. Phys Rev, 1977, A55: 744–750.
[73] Vemuri G, Agarwal G S. Phys Rev, 1996, A53: 1060–1064.
Imamoglu A, Field J E, Harris S E, Phys Rev Lett, 1991, 66: 1154–1156.
[74] Cen L X, Wang S J. Dynamics of atom-cavity system and elimination of momemtum recoil. J. Phys. A, 2000, A33: 1–7.
[75] Zhang S L, Li F L. J Phys, 1996，A29 ：6143–6149.
[76] 张胜利. 私人通讯.
[77] 应祖建. 代数动力学和关联动力学在物理学中的应用. 兰州大学博士学位论文，1999.
[78] 胡济民，杨伯君，郑春开. 原子核理论. 1 卷，北京：原子能出版社，1987;
胡济民. 原子核理论. 2 卷. 北京：原子能出版社，1987.
[79] 徐躬耦，杨亚天. 原子核理论 (核结构与核衰变部分). 北京：高等教育出版社，1989;
徐躬耦，王顺金. 原子核理论 (核反应部分). 北京：高等教育出版社，1992.
[80] 王顺金. 物理学进展，1996，16(4): 99–136.
[81] 王顺金. 物理学进展，1997，17(4): 419–428.
[82] 王顺金，殷雄. 原子核中的无规运动. 中国科学院近代物理研究所主编. 重离子物理讨论会会议录. 兰州, 1987.
[83] Bohigas O, Giannoni M J, Schmit C. Phys Rev Lett, 1984, 52: 1–4.
[84] Bohigas O, Weidenmuller H A. Ann Rev Nucl Part, 1988, 38: 421–453.
[85] Bohr A, Mottelson B. Phys Scripta, 1980, 24: 71–76.
[86] Brody T A, Flores J, French J B, et al. Rev Mod Phys, 1981, 53: 385–480.

[87] Porter C E. Statistical Theories of Spectra: Fluctuation. New York: Academic press, 1963.
[88] Braco A. Nucl Phys, 1990, A519: 47c–59c.
[89] 内能堡 W，魏登米勒 H A. 重离子碰撞理论导论. 北京：原子能出版社，1980.
[90] Bertsch G F, Das Gupta S. Phys Rep, 1988, 160: 189–233.
[91] Wu C L, Feng D H, Chen X G, et al. Phys Rev, 1987, C36: 1157–1180.
[92] Eckardt B. Phys Rep, 1988, 163: 205–247.
[93] Haake F. Quanum Signatures of Chaos. Berlin: Springer-Verlag, 1992.
[94] Zhang W M, Martin C C, Feng D H, et al. Phys Rev Lett, 1988, 61: 2167–2170.
[95] Meredith D C, Koonin S E, Baranger M R. Phys Rev, 1988, A37: 3499–3513.
[96] Noerenberg W, Milek B. Nucl Phys, 1992, A545: 485c–496c.
[97] Dyson F J. J Math Phys, 1962, 3: 140-156; 1191–1198.
[98] Pechukas P. Phys Rev Lett, 1983, 51: 943–946.
[99] Yukawa T. Phys Rev Lett, 1985, 54: 1883–1886; Phys Lett, 1986, A116: 227–230.
[100] Wang S J, Chu S Y. Phys Rev, 1993, A47: 3546–3553.
[101] 王顺金. 兰州大学学报 (自然科学版)，1998, 33: 12–17.
[102] Wang S J, Chu S Y. J Phys, 1994, A27: 5655–5671.
[103] Berry M V, Tabor M. Proc R Soc, 1977, A 356: 375–394.
[104] Wang S J, Typel S, Weiguny A,et al. J Phys, 1998, A31: 5585–5598.
[105] Swiatecki W J. Nucl Phys, 1988, A 488: 375c–393c.
[106] 徐躬藕. 量子混沌运动. 上海：上海科学技术出版社，1995.
[107] Wang W G, Xu G O, Fu D J. Phys Lett, 1993, A183: 379–382.
[108] Xu G O, Yang Y T, Chin Phys Lett, 1999, 16(1): 6–8;
Xu G O, Xing Y Z, Yang Y T. Chin Phys Lett, 1999, 16(2): 82–84.
[109] Wang S J, Nemes M C, Salgueiro A N, et al. Phys Rev,2002, A66:1–8.
[110] Wang S J, An J H, Luo H G,et al. J Phys, 2003, A36: 829–840.
[111] Hou B P , Wang S J, Yu W L,et al. J Phys, 2004, A37: 8167–8176.
[112] Wang P, Wang S J, Zhang H. Chin Phys Lett, 2005, 22(1): 5–8.
[113] Su X F, Wang S J. Int J Mod Phys, 2005, B19: 2481–2485.
[114] Tao J, Wang S J. Chin Phys Lett, 2006, 23(12):3131–3134.
[115] Huo J L, Wang S J，Tao J. Chin Phys Lett, 2008, 25(3): 813–816.
[116] Huo J L, Wang S J. J Phys, 2010, B 43 (12): 125503–125507.
[117] Lewis Jr. H R. Phys Rev Lett, 1967, 18: 510–512;
Lewis H R, Riesenfeld W B. J Math Phys, 1969, 10: 1458–1473.
[118] Wei J, Norman E. J Math Phys, 1963, 4: 575–581.
[119] 王顺金. 人造量子系统的理论研究与代数动力学. 物理学进展, 1994. 19(4): 331–370.
[120] 王顺金, 张华. 物理计算的保真与代数动力学算法 I. 动力学系统的代数动力学解法与代数动力学算法. 中国科学 G 辑：物理学力学天文学, 2005，35(6):573–608.

[121] 王顺金, 张华. 物理计算的保真与代数动力学算法 II. 代数动力学算法与其他算法计算结果的比较. 中国科学 G 辑：物理学力学天文学, 2006，36(1):14–37.
[122] 王顺金, 张华. 物理计算的保真与代数动力学算法 III. 辛代数动力学算法. 中国科学 G 辑：物理学力学天文学, 2006，36(6): 561–578.
[123] 王顺金, 张华. 物理计算的保真与代数动力学算法 IV. 非线性偏微分方程的代数动力学解法和算法，中国科学 G 辑：物理学力学天文学 2007，37，待发表.
[124] 张华, 卢伟涛，王顺金. 物理计算的保真与代数动力学算法 V. 一维气象平流方程的代数动力学解法和算法. 中国科学 G 辑：物理学力学天文学，2008, 38(8): 1028–1037.
[125] 张华, 卢伟涛，王顺金. 物理计算的保真与代数动力学算法 VI. Burgers 方程的代数动力学解法和算法. 中国科学 G 辑：物理学力学天文学，2008: 38(11): 1576–1581.
[126] 卢伟涛, 王顺金, 张华. 人造地球卫星运动方程的代数动力学算法数值解. 物理学报，2007, 56(7):3655–3661.
[127] Lu W T，Zhang H, Wang S J. Application of symplectic algebraic dynamics algorithm to circular restricted three-body problem. Chin Phys Lett, 2008, 25(7):2342–2345.
[128] 刘成仕. 中国科学 G 辑：物理学力学天文学, 2010, 40(9): 1099–1104.

# 第 15 章　系统–环境耦合运动模式与耦合动力学*

## 15.1　系统–环境耦合问题的重要性

### 1. 宏观经典的系统–环境耦合问题

人类对系统–环境耦合问题的研究, 经历了三个阶段:

(1) 忽略系统–环境之间的耦合的孤立系统研究阶段；即微正则系综研究阶段；

(2) 考虑系统–环境之间的平衡态耦合的开放系统研究阶段, 即正则系综和巨正则系综研究阶段；

(3) 考虑系统–环境之间的非平衡动力学耦合的动力学系统研究阶段，即非平衡动力学研究阶段。

现在, 正进入全面考查系统和环境之间的相互作用、相互耦合的研究阶段, 即仔细研究环境对系统的塑造作用和系统对环境的反作用。一个典型的宏观经典系统–环境耦合问题, 是人类与地球环境之间的耦合问题，表现为：

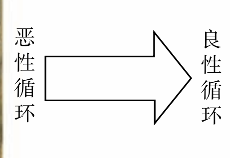
人类对地球的破坏：环境污染、过度开发、气候变化；

地球对人类的报复：自然灾害。

研究 “人类–地球环境耦合动力学” 应解决：

从 “人类破坏地球, 地球报复人类” 的恶性循环到 “人类善待地球, 地球回报人类” 的良性循环。








另一个典型的宏观经典系统–环境耦合问题, 是生物–环境之间耦合问题，表现为今天的人类参与了生物物种选择和进化，人类参与物种选择，使物种单一化；人类参与物种进化，诱导出危害人类的新病毒。

考虑到生物–环境之间耦合问题的这些新特点, 即人类已成为生物环境的极为重要的一部分, 是否应当修正达尔文主义, 关注和纠正人类参与生物物种选择和进

*本章基于在 “第七届彭桓武理论物理论坛” 上的报告 (2011.10.22, 四川大学, 成都)

化的不良后果?

2. 微观量子的系统–环境耦合问题

一个典型的微观量子的系统–环境耦合问题, 是量子调控系统的系统–环境耦合问题。量子小器件的动力学时间演化是非 Markov 过程，Markov 近似下的主方程不能很好描述这种演化，需要发展量子非 Markov 动力学。与此同时, 近年出现的量子达尔文主义 (quantum Darwinism) 则着重研究量子退相干 (耗散) 效应以外的环境对量子系统运动模式形成的选择性和塑造性的作用: 量子环境选择和塑造了量子系统的运动形态 (量子数)。

总之，无论宏观经典系统，还是微观量子系统，都存在系统与环境耦合问题, 都需要建立描述系统与环境耦合的动力学。对微观量子系统而言，量子信息和量子小器件研究，则促进了量子系统–环境耦合动力学的研究。这是自然科学, 特别是量子物理学的巨大进步, 是自然科学从分化走向综合，自然哲学从分析论哲学走向整体论哲学的表现。

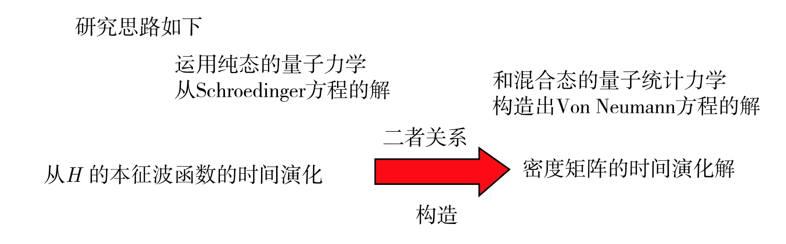
3. 从物理学角度研究微观量子系统与环境的耦合问题

本章只从物理学的角度研究微观量子调控系统的系统–环境耦合问题, 尝试建立描述量子系统–环境耦合运动模式的时间演化的动力学, 即量子系统–环境耦合动力学。研究方法如下：

(1) 用关联动力学建立量子系统–环境耦合动力学的一般形式；

(2) 用代数动力学求解两个具有代数结构的量子系统–环境的耦合问题。

理论工具是关联动力学和代数动力学。关联动力学描述系统的关联运动模式的时间演化, 擅长处理量子子系统之间的动力学耦合；代数动力学描述系统的量子对称运动模式的时间演化, 擅长求解具有对称性代数结构的量子系统。




## 15.2 量子系统–环境耦合动力学的一般形式

本节将运用多体关联动力学建立系统–环境耦合动力学的一般形式, 其步骤如下：从系统和环境这个大系统的密度矩阵的 von Neumann 方程出发，引进系统和环境两个子系统的约化密度矩阵并进行关联展开，建立系统和环境子系统的约化

密度矩阵的运动方程和它们的关联的运动方程，从中提取出平均场和关联场，然后研究耦合机制: 平均场效应和关联场效应。

多体关联动力学的基本要点：关联动力学是应原子核多体理论的需要而建立的，它描述大系统内各个子系统之间的耦合动力学行为。其基本思路是把多体系统分解为不同等级的相对独立的多体关联子系统，每个多体关联子系统都是彼此非线性耦合起来的开放系统, 把各个子系统耦合起来的基本物理量是平均场和多体关联。

对原子核多体系统而言, 多体关联的基本类型包括: 长程相互作用产生平均场整体关联，体现多粒子环境对每个粒子的整体平均影响，导致独立粒子运动, 如原子、原子核的壳层结构 (图 15-1)、固体的能带结构; 平均场变化产生系统的整体相干运动即集体运动 (一级效应), 如分子、原子核的转动和振动 (图 15-2); 平均场以外的剩余相互作用产生多粒子关联，导致集团运动、无规涨落、输运和耗散 (高阶效应)，如二体关联导致固体和原子核中的粒子对运动和超导、超流现象 (图 15-3); 四体关联导致原子核中的 $\alpha$-集团 (重原子核的 $\alpha$ 衰变现象); 多体关联的短程、高频部分导致涨落运动, 如耗散、输运和时空混沌，相互作用的时空非线性使频率–波矢非线性增长导致运动时空结构碎裂。运动的时空混沌就是运动的时空结构碎裂。

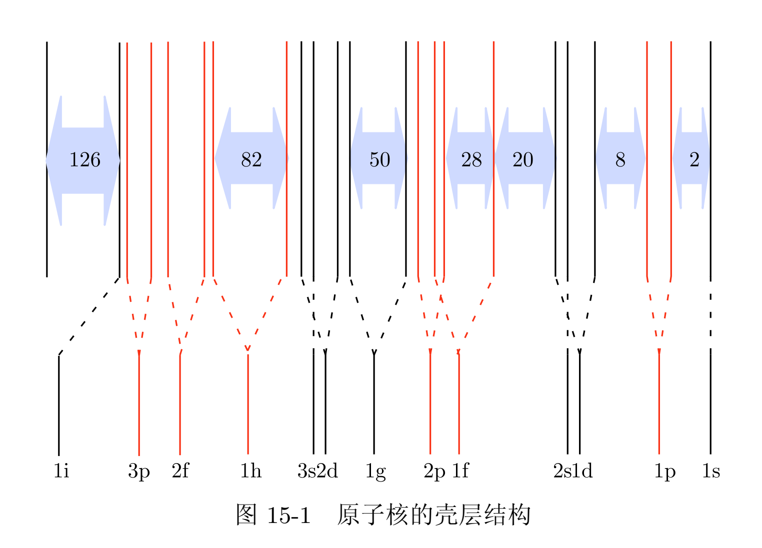



图 15-1 原子核的壳层结构

现在运用关联动力学去建立系统–环境耦合动力学的一般方程。系统–环境耦合系统可表述为耦合的二元子系统的相互作用、相互影响的动力学问题。其模型 Hamilton 量由三部分组成：

$$H(12) = H(1) + H(2) + V(12) \tag{15-1}$$

系统 环境 相互作用

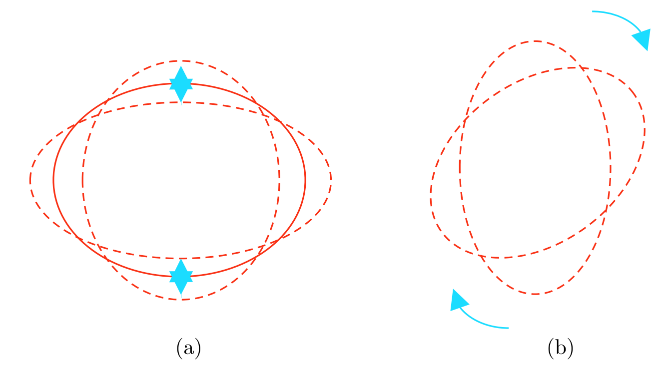



图 15-2　(a) 原子核振动;(b) 原子核转动

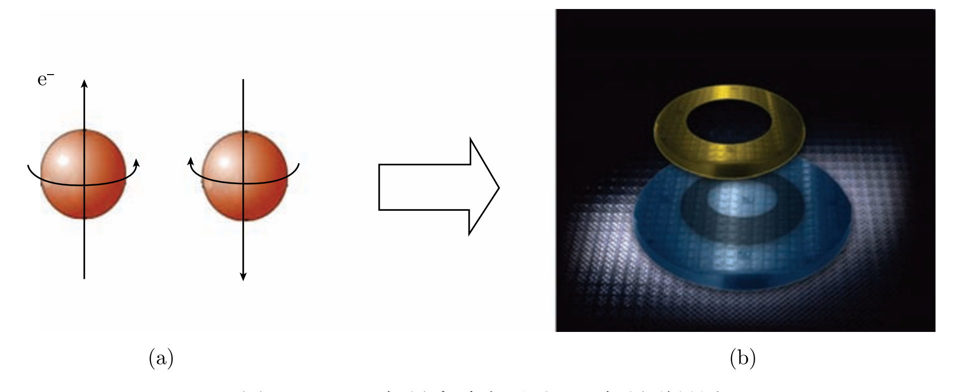



图 15-3　(a) 超导库珀电子对;(b) 超导磁悬浮

其中，(1) 表示系统全部自由度集合 (2) 表示环境全部自由度集合。

由于系统是非相对论的而环境通常是混合态, 总系统的动力学演化应服从密度矩阵的 von Neumann 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\rho(12)}{\partial t}=[H(12),\rho(12)]=[H(1)+H(2)+V(12),\rho(12)] \tag{15-2}$$

引进系统和环境子系统的约化密度矩阵

$$\rho(i)=\mathrm{Tr}_{(j)}\rho(ij),\quad i,j=1,2 \tag{15-3}$$

从总系统的 von Neumann 方程可求得系统–环境耦合动力学的完备方程组。

设系统和环境的粒子不是全同粒子，则密度矩阵的关联 (集团) 展开为

$$\rho(12)=\rho(1)\rho(2)+C(12) \tag{15-4}$$

式 (15-4) 也可看成系统与环境的关联 $C(12)$ 的定义

$$C(12)=\rho(12)-\rho(1)\rho(2) \tag{15-5}$$

由此可得关联的求迹性质 (表明 $C(12)$ 不包含因而独立于 $\rho(i)$)

$$\mathrm{Tr}_{(i)}C(ij)=\mathrm{Tr}_{(j)}C(ij)=0 \tag{15-6}$$

两个子系统的约化密度矩阵 $\rho(i)$ 的运动方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\rho(i)}{\partial t}=[H(i)+V_i(i),\rho(i)]+\mathrm{Tr}_{(j)}[V(ij),C(ij)] \tag{15-7}$$

系统–环境耦合动力学完备方程组包括子系统 1 和系统 2 的运动方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\rho(1)}{\partial t}=[H(1)+V_1(1),\rho(1)]+\mathrm{Tr}_{(2)}[V(12),C(12)] \tag{15-8a}$$

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\rho(2)}{\partial t}=[H(2)+V_2(2),\rho(2)]+\mathrm{Tr}_{(1)}[V(12),C(12)] \tag{15-8b}$$

和关联的运动方程

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar\frac{\partial C(12)}{\partial t}=&[H(1)+H(2)+V(12),C(12)]+[V(12)-V_1(1)-V_2(2),\rho(1)\rho(2)]\\&-\rho(1)\mathrm{Tr}_{(1)}[V(12),C(12)]-\mathrm{Tr}_{(2)}[V(12),C(12)]\rho(2)\end{aligned} \tag{15-9}$$

两个子系统之间的耦合机制有两种：

(1) 通过平均场 $V_i(i)$ 的相互影响 —— 平均场效应；

(2) 通过关联场 $V_c(i,i')$ 的相互影响 —— 关联场效应。

平均场定义为相互作用对另一方子系统密度矩阵平均

$$V_i(i)=\mathrm{Tr}_{(j)}V(ij)\rho(j),\quad i,j=1,2 \tag{15-10}$$

关联场定义为相互作用对关联中另一方自由度平均

$$V_c(i,i')=\mathrm{Tr}_{(j)}\left[V(ij)C(ij,i'j)-C(ij,i'j)V(i'j)\right],\quad i,j=1,2 \tag{15-11}$$

引进系统和环境的本征基矢展开, 可显示平均场和关联场的微观结构。

设 $\psi_\alpha(1)$ 为 $H(1)$ 的本征态完备集，$\phi_\beta(2)$ 为 $H(2)$ 的本征态完备集，则有密度矩阵和关联的本征矢展开

$$\begin{aligned}&\rho(1,1')=\sum_{\alpha\alpha'}n^1_{\alpha\alpha'}\psi_\alpha(1)\psi^*_{\alpha'}(1'),\rho(2,2')=\sum_{\alpha\alpha'}n^2_{\beta\beta'}\phi_\beta(2)\phi^*_{\beta'}(2')\\&C(12,1'2')=\sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'}C_{\alpha\beta\alpha'\beta'}\psi_\alpha(1)\phi_\beta(2)\psi^*_{\alpha'}(1')\phi^*_{\beta'}(2')\end{aligned} \tag{15-12}$$

式 (15-12) 把系统–环境耦合动力学方程组转化为展开式系数的运动方程组。

由式 (15-6) 和式 (15-12) 得关联矩阵元的求迹性质

$$\sum_\beta C_{\alpha\beta\alpha'\beta}=\Delta\rho(1)_{\alpha\alpha'}=0,\quad \sum_\alpha C_{\alpha\beta\alpha\beta'}=\Delta\rho(2)_{\beta\beta'}=0 \tag{15-13}$$

式 (15-13) 表明，关联对子系统的约化密度矩阵无贡献，它描述两个系统之间的纯关联 (包含统计关联和动力学关联)。

平均场可具体表示为

$$V_1(1)=\sum_{\beta\beta'}n^2_{\beta\beta'}\left\langle\phi_\beta(2)\left|V(12)\right|\phi_{\beta'}(2)\right\rangle,\quad V_2(2)=\sum_{\alpha\alpha'}n^1_{\alpha\alpha'}\left\langle\psi_\alpha(1)\left|V(12)\right|\psi_{\alpha'}(1)\right\rangle \tag{15-14a}$$

关联场可具体表示为

$$V_c(1)=V_c(1,1')=\sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'}C_{\alpha\beta,\alpha'\beta'}\left\langle\phi_\beta(2)\left|V(12)-V(1'2)\right|\phi_{\beta'}(2)\right\rangle\psi_\alpha(1)\psi^*_{\alpha'}(1') \tag{15-14b}$$

$$V_c(2)=V_c(2,2')=\sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'}C_{\alpha\beta,\alpha'\beta'}\left\langle\psi_\alpha(1)\left|V(12)-V(12')\right|\psi_{\alpha'}(1)\right\rangle\phi_\beta(2)\phi^*_{\beta'}(2') \tag{15-14c}$$

式 (15-14) 表明，关联场的对角元为零 ($V_c(i,i), i=1,2$)，它完全来自非对角元, 描述关联效应和量子波相干效应。对系统和环境的量子态 $\alpha,\beta$ 求和, 体现出系统和环境的量子态的涨落与纠缠 (密度矩阵形式的纠缠是波函数形式的纠缠的量子统计力学推广)。由于系数 $n^1_{\alpha\alpha'}(t), n^2_{\beta\beta'}(t), C_{\alpha\beta\alpha'\beta'}(t)$ 依赖时间，平均场和关联场一般与时间有关。

系统–环境耦合动力学包含的物理信息:

系统–环境耦合动力学方程组可简捷地表示为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\rho(1)}{\partial t}=[H(1)+V_1(1),\rho(1)]+V_c(1) \tag{15-15a}$$

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\rho(2)}{\partial t}=[H(2)+V_2(2),\rho(2)]+V_c(2) \tag{15-15b}$$

系统和环境子系统的运动方程都包含各自的平均场和关联场。

关联的运动方程

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar\frac{\partial C(12)}{\partial t}=&[H(1)+H(2)+V(12),C(12)]+[V(12)-V_1(1)-V_2(2),\rho(1)\rho(2)]\\&-\rho(1)\mathrm{Tr}_{(1)}[V(12),C(12)]-\mathrm{Tr}_{(2)}[V(12),C(12)]\rho(2)\end{aligned} \tag{15-16}$$

与系统和环境的运动方程一起组成自洽的运动方程组。

从上述耦合动力学方程组可得以下信息，可供近似理论的参考。

耦合机制：系统和环境是通过自身产生的平均场和关联场的形式去影响对方的, 形成一个耦合的、自洽的动力学演化系统。

平均场一般是时间有关的，表现为泛函形式的自洽外场，体现系统和环境之间相互之间的整体平均影响：能量–信息流平均地、整体地双向流动以交换平均能量–信息的形式，体现出非 Markov 效应、推迟效应和互为因果效应。

关联场一般也是时间有关的，描述系统和环境的内部微观量子态之间的交错与纠缠，体现出系统和环境的内部微观结构之间的交织与影响。系统和环境的微观

能量–微观信息细致地双向流动。两个子系统的自由度 (约化密度矩阵) 不可分离变量, 关联场从形式上表现为由关联诱发的自洽外源项。

上述完备方程组表明, 只考虑平均场是不完备的，它们不能描述系统–环境之间内部微观结构和信息的交换与纠缠，关联场对于完善描述这些物理效应是必不可少的。

上述物理信息对量子调控系统研究, 特别是非 Markov 动力学研究, 是十分重要的、有参考价值的。下面两个实例将具体展示上述性质。

## 15.3 量子系统–环境耦合动力学的两个具体例子

两个具有代数结构的量子系统的系统–环境耦合动力学方程的建立步骤:

(1) 先用代数动力学求得 Schroedinger 方程的本征解析解, 进而获得总系统的密度矩阵的解析解;

(2) 再用量子统计力学求得系统和环境子系统的约化密度矩阵的运动方程;

(3) 从子系统的运动方程中提取系统和环境的平均场和关联场并研究其性质。

所用理论工具是代数动力学，请参看第 14 章。

### 15.3.1 二能级原子 (系统) 与单模辐射场 (环境) 耦合

1. 模型 Hamilton 量及其动力学代数结构

$$H = H_A + H_P + V_{AP} = \underbrace{\frac{1}{2}\omega_0\sigma_0}_{\text{原子}} + \underbrace{\omega b^+ b}_{\text{光子}} + \underbrace{g(\sigma_- b^+ + \sigma_+ b)}_{\text{相互作用}} \tag{15-17}$$

此模型有 $U(2)$ 动力学对称性，可解析求解。

定义激发算子和 SU(2) 生成元

$$\varDelta = \frac{1}{2}\sigma_0 + b^+ b, \quad \varSigma_+ = b\sigma_+, \quad \varSigma_- = b^+\sigma_- \tag{15-18}$$

可证有 SU(2) 闭合代数

$$\begin{aligned} &[\sigma_0, \varSigma_+] = \pm 2\varSigma_\pm, && \sigma_0 = 2\varSigma_0/(2\varDelta + 1) \\ &[\varSigma_0, \varSigma_\pm] = \pm 2\left(\varDelta + \frac{1}{2}\right)\varSigma_\pm, && [\varSigma_+, \varSigma_-] = \varSigma_0 = \left(\varDelta + \frac{1}{2}\right)\sigma_0 \end{aligned} \tag{15-19}$$

$\varDelta$ 与 $\{\varSigma_0, \varSigma_+, \varSigma_-\}$ 对易, 在其本征态子空间，$\{\varSigma_0, \varSigma_+, \varSigma_-\}$ 构成闭合的 SU(2) 代数。该系统具有 SU(2) 动力学对称性, Hamilton 量可改写为代数生成元和不变算子的线性函数

$$H = H_A + H_P + V_{AP} = \frac{1}{2}\Delta\omega_0\sigma_0 + \omega\varDelta + g(\varSigma_- + \varSigma_+)$$

$$\Delta\omega_0 = \omega_0 - \omega \tag{15-20}$$

2. 用代数动力学方法求 Hamilton 量的定态本征解

通过两次相似变换把 Hamilton 量对角化

$$
\begin{aligned}
&\mathrm{e}^{x\Sigma_+}H\mathrm{e}^{-x\Sigma_+}=\omega\Delta+\left(\frac{\Delta\omega_0}{2}+gx\left(\Delta+\frac{1}{2}\right)\right)\sigma_0+g\Sigma_-=H_1\\
&g-\Delta\omega_0x-gx^2\left(\Delta+\frac{1}{2}\right)=0\\
&\bar{H}=\mathrm{e}^{-y\Sigma_-}H_1e^{y\Sigma_-}=\omega\Delta+\left(\frac{\Delta\omega_0}{2}+gx\left(\Delta+\frac{1}{2}\right)\right)\sigma_0\\
&2y\left(\frac{\Delta\omega_0}{2}+gx\left(\Delta+\frac{1}{2}\right)\right)-g=0
\end{aligned}
\tag{15-21}
$$

求得本征解为

$$
\begin{aligned}
&\bar{H}\left|\bar{\Psi}_{N\alpha}\right\rangle=E_{N\alpha}\left|\bar{\Psi}_{N\alpha}\right\rangle,\sigma_0\left|\bar{\Psi}_{N\alpha}\right\rangle=\alpha\left|\bar{\Psi}_{N\alpha}\right\rangle\\
&\Delta\left|\bar{\Psi}_{N\alpha}\right\rangle=N\left|\bar{\Psi}_{N\alpha}\right\rangle,N=n+\frac{\alpha}{2},\left|\bar{\Psi}_{N\alpha}\right\rangle=|n,\alpha\rangle
\end{aligned}
\tag{15-22}
$$

本征能量为

$$
\begin{aligned}
&E_{n\alpha}=n\omega+\frac{1}{2}\omega_0\alpha+\Delta E(g,N,\alpha)\\
&\Delta E(n,\alpha)=-\frac{\omega_0-\omega}{2}\alpha+C(n,\alpha)\\
&C(n,\alpha)=\frac{\alpha}{2}\sqrt{(\omega_0-\omega)^2+4g^2\left(n+\frac{\alpha}{2}+\frac{1}{2}\right)}
\end{aligned}
\tag{15-23}
$$

归一化本征波函数

$$
\begin{aligned}
|\Psi_{N\alpha}\rangle=&N_{n\alpha}\mathrm{e}^{-x\Sigma_+}\mathrm{e}^{y\Sigma_-}|\bar{\Psi}_{N\alpha}\rangle\\
=&N_{n\alpha}([1-xy(n+1)]|n,\alpha\rangle-x\sqrt{n}|n-1,\alpha+2\rangle+y\sqrt{n+1}|n+1,\alpha-2\rangle)\\
=&N_{n\alpha}([1-xy(n+1)]|n\rangle-x\sqrt{n}\sigma_+|n-1\rangle+y\sqrt{n+1}\sigma_-|n+1\rangle)|\alpha\rangle\\
N_{n\alpha}=&([1-xy(n+1)]^2+y^2(n+1)\delta_{\alpha1}+x^2n\delta_{\alpha-1})^{-1/2}
\end{aligned}
\tag{15-24}
$$

由于 $x,y$ 是算子 $\Delta$ 和 $\sigma_0$ 或其本征值 $(n,\alpha)$ 的非线性函数，原子和光子态耦合在一起。

3. 构造总系统的 von Neumann 方程的密度矩阵解

总系统的 von Neumann 方程

$$
\mathrm{i}\frac{\partial\rho(A,P)}{\partial t}=[H,\rho(A,P)]
\tag{15-25}
$$

初始条件

$$\rho(A,P,t=0)=\sum_{N\alpha}w_{N\alpha,N'\alpha'}\,|\,\varPsi_{N\alpha}\,\rangle\langle\,\varPsi_{N'\alpha'}| \tag{15-26}$$

时间有关的密度矩阵解可从上述 Hamilton 量的本征解构造出

$$\rho(A,P,t)=\sum_{\alpha\alpha'}\sum_{nn'}W_{n\alpha n'\alpha'}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(n-n')\omega t}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\alpha-\alpha')\omega_0 t/2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\varDelta_{n\alpha}-\varDelta_{n'\alpha'})t}\,|\,\varPsi_{n\alpha}\,\rangle\langle\,\varPsi_{n'\alpha'}|$$

$$\begin{aligned}|\,\varPsi_{n\alpha}\rangle&=N_{n\alpha}(1-x\varSigma_+)(1+y\varSigma_-)|n,\alpha\rangle\\ \langle\varPsi_{n'\alpha'}|&=N_{n'\alpha'}\langle n',\alpha'|(1+y\varSigma_+)(1-x\varSigma_-)\end{aligned} \tag{15-27}$$

原子、光子初始条件的独立性为

$$W_{n\alpha n'\alpha'}=W_{\alpha\alpha'}W_{nn'}$$

时间有关的总的密度矩阵解具体形式用原子和光子的本征和激发算子表示

$$\begin{aligned}\rho(A,P,t)=&\sum_{\alpha\alpha'}W_{\alpha\alpha'}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\alpha-\alpha')\omega_0 t/2}\sum_{nn'}W_{nn'}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(n-n')\omega t}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\varDelta(n,\alpha)-\varDelta(n',\alpha'))t}N_{n\alpha}N_{n'\alpha'}\\&\times(1-x\varSigma_+)(1+y\varSigma_-)|n,\alpha\rangle\langle n',\alpha'|(1+y\varSigma_+)(1-x\varSigma_-)\end{aligned} \tag{15-28}$$

4. 原子的约化密度矩阵来自对光子自由度求迹 (平均)

$$\begin{aligned}&\rho(A,t)\\=&\mathrm{Tr}_{(P)}\rho(A,P,t)\\=&\sum_{\alpha\alpha'}W_{\alpha\alpha'}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\alpha-\alpha')\omega_0 t/2}\sum_{n}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\varDelta(n,\alpha)-\varDelta(n,\alpha'))t}N_{n\alpha}N_{n\alpha'}\\&\times\{[1-x(n,\alpha)y(n,\alpha)(n+1)]|\alpha\rangle\langle\alpha'|[1-x(n,\alpha')y(n,\alpha')(n+1)]\\&+x(n,\alpha)\sqrt{n}\sigma_+|\alpha\rangle\langle\alpha'|\sigma_-x(n,\alpha')\sqrt{n}\\&+y(n,\alpha)\sqrt{n+1}\sigma_-|\alpha\rangle\langle\alpha'|\sigma_+y(n,\alpha')\sqrt{n+1}\}\end{aligned} \tag{15-29}$$

$$\begin{aligned}&\mathrm{i}\frac{\partial\rho(A,t)}{\partial t}\\=&[H_A,\rho(A,t)]+\sum_{\alpha\alpha'}W_{\alpha\alpha'}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\alpha-\alpha')\omega_0 t/2}\sum_{n}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\varDelta(n,\alpha)-\varDelta(n,\alpha'))t}N_{n\alpha}N_{n\alpha'}\\&\times[\![\varDelta(n,\alpha)\{[1-x(n,\alpha)y(n,\alpha)(n+1)]|\alpha\rangle\langle\alpha'|[1-x(n,\alpha')y(n,\alpha')(n+1)]\\&+x(n,\alpha)\sqrt{n}\sigma_+|\alpha\rangle\langle\alpha'|\sigma_-x(n,\alpha')\sqrt{n}+y(n,\alpha)\sqrt{n+1}\sigma_-|\alpha\rangle\langle\alpha'|\sigma_+y(n,\alpha')\sqrt{n+1}\}\\&-\{[1-x(n,\alpha)y(n,\alpha)(n+1)]|\alpha\rangle\langle\alpha'|[1-x(n,\alpha')y(n,\alpha')(n+1)]\\&+x(n,\alpha)\sqrt{n}\sigma_+|\alpha\rangle\langle\alpha'|\sigma_-x(n,\alpha')\sqrt{n}\\&+y(n,\alpha)\sqrt{n+1}\sigma_-|\alpha\rangle\langle\alpha'|\sigma_+y(n,\alpha')\sqrt{n+1}\}\Delta(n,\alpha')]\!]\\=&[(H_A+V(A)),\rho(A,t)]+V_c(A)\end{aligned} \tag{15-30}$$

原子 Hamilton 量为

$$H_A=\frac{1}{2}\omega_0\sigma_0 \tag{15-31}$$

5. 提取原子的平均场和关联场

1) 平均场。

$$V(A,t) = \delta\omega\frac{\sigma_0}{2} + \varepsilon_0, \quad \delta\omega = \frac{2g^2(\omega_0 - \omega)}{(\Delta\omega_0)^2}, \quad \varepsilon_0 = \frac{g^2(\omega_0 - \omega)}{(\Delta\omega_0)^2} \tag{15-32}$$

平均场对原子的 Hamilton 量修正使原子的本征能级发生移动

$$H_A + V(A,t) = (\omega_0 + \delta\omega)\frac{\sigma_0}{2} + \varepsilon_0 \tag{15-33}$$

2) 关联场 (关联算子一级近似)。

关联场是时间有关的、纠缠的。包括非 Markov 效应、推迟效应、互为因果效应和纠缠交织效应, 来自光子数涨落和原子能级涨落的贡献，表现为对光子数和能级涨落求和, 如图 15-4 所示。

$\sum_{n=1}$　$C_n$　　$+C_{n-1}$

$n$　　$n-1$

图 15-4　对光子数和能级落求和

其表达式为

$$\begin{aligned}
&V_c(A,t)\\
&=\sum_{\alpha\alpha'} W_{\alpha\alpha'}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\alpha-\alpha')\omega_0 t/2}\sum_n \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\Delta E(n,\alpha)-\Delta E(n,\alpha'))t}N_{n\alpha}N_{n\alpha'}\\
&\quad\times[[\chi(n,\alpha)\{[1-x(n,\alpha)y(n,\alpha)(n+1)]|\alpha\rangle\langle\alpha'|[1-x(n,\alpha')y(n,\alpha')(n+1)]\\
&\quad+x(n,\alpha)\sqrt{n}\sigma_+|\alpha\rangle\langle\alpha'|\sigma_- x(n,\alpha')\sqrt{n}+y(n,\alpha)\sqrt{n+1}\sigma_-|\alpha\rangle\langle\alpha'|\sigma_+ y(n,\alpha')\sqrt{n+1}\}\\
&\quad-\{[[1-x(n,\alpha)y(n,\alpha)(n+1)]|\alpha\rangle\langle\alpha'|[1-x(n,\alpha')y(n,\alpha')(n+1)]\\
&\quad+x(n,\alpha)\sqrt{n}\sigma_+|\alpha\rangle\langle\alpha'|\sigma_- x(n,\alpha')\sqrt{n}\\
&\quad+y(n,\alpha)\sqrt{n+1}\sigma_-|\alpha\rangle\langle\alpha'|\sigma_+ y(n,\alpha')\sqrt{n+1}\}\chi(n,\alpha')]]
\end{aligned}\tag{15-34}$$

$$\chi(n,\alpha) = \frac{2g^2(\omega_0-\omega)}{(\Delta\omega_0)^2}n\alpha, \quad \chi(b^+b,\sigma_0) = \frac{2g^2(\omega_0-\omega)}{(\Delta\omega_0)^2}b^+b\sigma_0$$

关联场只有非对角元有贡献，反映出关联–涨落的物理过程。原子上下能级的跃迁与涨落，伴随着光子的发射与吸收，以及相应的光场的光子数的涨落。这源自原子–光子相互作用，把光子场与原子态耦合–纠缠在一起，使得关联场中两种密度矩阵子空间纠缠起来，不能分解成光场密度矩阵和原子密度矩阵的乘积。

同样，可以得到光子的约化密度矩阵的运动方程 (略)。

### 15.3.2 耦合的双模腔光场系统：动力学代数结构

Hamilton 量为

$$H = \omega_a a^+ a + \omega_b b^+ b + g(a^+ b + b^+ a) \tag{15-35}$$

$a$ 类光子 $b$ 类光子 双线性耦合

引进激发算子

$$\varDelta = \frac{1}{2}(a^+ a + b^+ b) \tag{15-36a}$$

和 su(1,1) 算子

$$\begin{aligned} k_0 &= \frac{1}{2}(a^+ a - b^+ b) \\ k_+ &= a^+ b, \quad k_- = b^+ a \end{aligned} \tag{15-36b}$$

可检验

$$[\varDelta, b^+ b] = [\varDelta, a^+ b] = [\varDelta, b^+ a] = [\varDelta, H] = 0 \tag{15-37a}$$

和 su(1,1) 对易关系

$$[k_0, k_+] = k_+, [k_0, k_-] = -k_-, [k_-, k_+] = -2k_0 \tag{15-37b}$$

Hamilton 量具有 su(1,1) 动力学代数结构可表为激发算子和生成元线性函数

$$\begin{aligned} H &= \omega_{ab}\varDelta + \Delta\omega k_0 + g(k_+ + k_-) \\ \omega_{ab} &= \omega_a + \omega_b, \quad \Delta\omega = \omega_a - \omega_b \end{aligned} \tag{15-38}$$

1. 用代数动力学方法求 Hamilton 量的定态本征解

本征解可通过两次相似变求得

$$\begin{aligned} \mathrm{e}^{xk_+} H \mathrm{e}^{-xk_+} =& \omega_{ab}\varDelta + \Delta\omega(k_0 - xk_+) + gk_+ + g(k_- + 2xk_0 - x^2 k_+) \\ =& \omega_{ab}\varDelta + (\Delta\omega + 2xg)k_0 + gk_- + (g - x\Delta\omega - x^2 g)k_+ \\ =& \omega_{ab}\varDelta + (\Delta\omega + 2gx)k_0 + gk_- \\ =& H_1 \\ x =& \frac{1}{2}\left[-\frac{\Delta\omega}{g} + \sqrt{\left(\frac{\Delta\omega}{g}\right)^2 + 4}\right] \end{aligned} \tag{15-39a}$$

$$\begin{aligned} \mathrm{e}^{yk_y} H_1 \mathrm{e}^{-yk_-} =& \omega_{ab}\varDelta + (\Delta\omega + 2gx)(k_0 + yk_-) + gk_- \\ =& \omega_{ab}\varDelta + (\Delta\omega + 2gx)k_0 + [g + y(\Delta\omega + 2gx)]k_- \\ =& \omega_{ab}\varDelta + (\Delta\omega + 2gx)k_0 \\ =& (\omega_a + gx)a^+ a + (\omega_b - gx)b^+ b \\ =& \bar{H} \end{aligned}$$

$$gx \approx \frac{1}{4}\left(\frac{g}{\Delta\omega}\right)^2 \Delta\omega, \quad y = -\frac{g}{\Delta\omega + 2gx} \tag{15-39b}$$

由于 $x, y$ 与 $n_a, n_b$ 无关，$\bar{H}(x)$ 中的独立准粒子是退耦合的原来的粒子，平均场使粒子能量重整化，$a$、$b$ 光子系统成为无耦合的系统. 两个系统的约化密度矩阵的运动方程是彼此独立的、无耦合的。

本征方程为

$$\begin{aligned}
\bar{H}|n_a n_b\rangle &= E(n_a, n_b)|n_a n_b\rangle, \\
\Delta|n_a n_b\rangle &= \Delta(n_a, n_b)|n_a n_b\rangle, \\
k_0|n_a n_b\rangle &= \mu(n_a, n_b)|n_a n_b\rangle
\end{aligned} \tag{15-40a}$$

本征值为

$$\begin{aligned}
&E(n_a, n_b) = n_a(\omega_a + gx) + n_b(\omega_b - gx) \\
&\Delta(n_a, n_b) = \frac{1}{2}(n_a + n_b), \quad \mu(n_a, n_b) = \frac{1}{2}(n_a - n_b)
\end{aligned} \tag{15-40b}$$

本征态矢

$$\begin{aligned}
|\varPsi_{n_a n_b}\rangle =& \mathrm{e}^{-xk_+}\mathrm{e}^{-yk_-}|n_a n_b\rangle = \sum_{m_a m_b} \frac{(-x)^{m_a}(-y)^{m_b}}{m_a! m_b!}(a^+ b)^{m_a}(b^+ a)^{m_b}|n_a n_b\rangle \\
=& \sum_{m_+ m_-} \frac{(xy)^{m_+/2}(x/y)^{m_-/2}}{[(m_+ + m_-)/2]![(m_+ - m_-)/2]!} \frac{[n_b + (m_+ - m_-)/2]!}{[n_a - (m_+ + m_-)/2]!} \\
&\times \sqrt{\frac{n_a!(n_a + m_-)!}{n_b!(n_b - m_-)!}}|(n_a + m_-)(n_b - m_-)\rangle \\
m_+ =& m_a + m_b, \quad m_- = m_a - m_b, \quad m_a = (m_+ + m_-)/2, \\
&m_b = (m_+ - m_-)/2
\end{aligned} \tag{15-40c}$$

2. 构造总系统的 von Neumann 方程的密度矩阵解

由于光子 $a$ 和 $b$ 的独立性，初态为

$$\rho(a, b, t = 0) = \sum_{n_a n_b} W_{n_a n_b n'_a n'_b} \left| \varPsi_{n_a n_b} \right\rangle \left\langle \varPsi_{n'_a n'_b} \right| \tag{15-41a}$$

可从上述本征解构造出总系统的时间有关的密度矩阵解

$$\begin{aligned}
&\rho(a, b, t) \\
=& \sum_{n_a n_b} W_{n_a n_b n'_a n'_b} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}n_a(\omega_a + gx)t - \mathrm{i}n_b(\omega_b - gx)t} \mathrm{e}^{\mathrm{i}n'_a(\omega_a + gx)t + \mathrm{i}n'_b(\omega_b - gx)t} \\
&\times |\varPsi_{n_a n_b}\rangle\langle \varPsi_{n'_a n'_b}|
\end{aligned} \tag{15-41b}$$

对 $b$ 光子求平均 (迹) 得到 $a$ 光子的约化密度矩阵

$$\begin{aligned}\rho(a,t) =&\mathrm{Tr}_b\rho(a,b,t) = \sum_{n_a n_a'} W_{n_a n_a'} \sum_{n_b} W_{n_b n_b'} N_{n_a n_b} N_{n_a' n_b} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(n_a - n_a')(\omega_a + gx)t} \\ &\times \sum_{m_+ m_+' m_-} \frac{(xy)^{m_+/2}(x/y)^{m_-/2}[n_b + (m_+ + m_-)/2]!}{[(m_+ + m_-)/2]![(m_+ - m_-)/2]!} \\ &\times \sqrt{\frac{1}{n_b!(n_b + m_-)!}}(a^+)^{(m_+ + m_-)/2}(a)^{(m_+ - m_-)/2}|n_a\rangle\langle n_a'| \end{aligned} \tag{15-42}$$

式 (15-42) 对时间求导数得到 a 光子约化密度矩阵的运动方程

$$\mathrm{i}\frac{\partial\rho(a,t)}{\partial t} = [H_a + V_a, \rho(a,t)], \quad H_a = \omega_a a^+ a \tag{15-43a}$$

双线性耦合完全转化为静态平均场, 无关联场:

$$V_a = gxa^+a \tag{15-43b}$$

由于对称性，类似地有 b 光子约化密度矩阵的运动方程

$$\mathrm{i}\frac{\partial\rho(b,t)}{\partial t} = [H_b + V_b, \rho(b,t)], \quad H_b = \omega_b b^+ b \tag{15-44a}$$

同样, 双线性耦合完全转化为静态平均场, 无关联场

$$V_b = -gxb^+b \tag{15-44b}$$

双线性耦合模型是独立粒子模型，光子之间的双线性关联完全包含于平均场中，通过平均场，光子变成能量重整化的独立准粒子。准粒子之间无耦合，运动方程彼此独立，在各自的静态平均场中独立运动。因此不存在关联场。

从另一角度看, 双线性耦合是一体算符，Hamilton 量总可以对角化, 使双线性耦合转化为静态平均场，系统变成无相互作用的独立准粒子的 Hamilton 量, 因而无关联场。

上述模型中粒子之间的双线性耦合与关联，也可看成表象不同的粒子的关联与耦合，可以通过线性变换使其退耦。而在第一个例子中, 非线性相互作用导致的耦合与关联则不同，它是不能通过表象变换消除的，是真正的动力学耦合与关联。

## 15.4 量子系统–环境耦合动力学需要深入研究的问题

模型研究目的在于了解系统–耦合动力学的具体内容：平均场和关联场的形式和性质, 为真实模型的近似求解提供线索。研究的步骤是从精确解 (现象) 导出运动方程 (本质)。

(1) 对实际问题研究。①对系统而言，原则上要考虑系统所有自由度, 但需要突出与环境耦合较强的系统的自由度和运动模式; ② 对环境而言，只需考虑与系统耦合的环境的相关自由度，特别是与系统匹配的环境的运动模式。

(2) 对真实的量子位和逻辑门系统，应采用先建立耦合动力学方程 (本质) 然后求解 (现象) 的研究途径。它们包括

①单量子位和一位逻辑门: 二能级原子与单 (多) 模辐射场耦合系统。

单模为简化模型，有 U(2) 动力学对称性，已经研究并解析求解了。

$$H = H_A + H_P + V_{AP} = \omega_0\sigma_0 + \omega b^+b + g(\sigma_-b^+ + \sigma_+b) \tag{15-45a}$$

多模为真实模型，每个 $k$ 空间有动力学对称性，但不同 $k$ 的代数通过原子耦合起来

$$\begin{aligned} H =& H_A + H_P + V_{AP} \\ =& \omega_0\sigma_0 + \sum_k \omega_k b_k^+ b_k + \sum_k g_k(\sigma_- b_k^+ + \sigma_+ b_k) \end{aligned} \tag{15-45b}$$

一般情况可得耦合动力方程组, 但须数值求解; 特殊情况可求得解析解。

②二位逻辑门 (如控制非门): 两个二能级原子与单 (多) 模辐射场耦合，一般情况可得耦合动力学方程组, 但须数值求解。包括

单模

$$\begin{aligned} H =& H_A + H_P + H_{AP} \\ =& \omega_0[\sigma_0(1) + \sigma_0(2)] + \omega b^+b + g[(\sigma_-(1) + \sigma_-(2))b^+ + (\sigma_+(1) + \sigma_+(2))b] \end{aligned} \tag{15-46a}$$

多模

$$\begin{aligned} H =& H_A + H_P + H_{AP} = \omega_0[\sigma_0(1) + \sigma_0(2)] \\ &+ \sum_k \omega_k b_k^+ b_k + \sum_k g_k[(\sigma_-(1) + \sigma_-(2))b_k^+ + (\sigma_+(1) + \sigma_+(2))b_k^+] \end{aligned} \tag{15-46b}$$

(3) 研究相互作用的对称性对平均场和关联场的影响。平均场和关联场的性质、对称性、参数化与特征系数 (如耗散–输运系数、记忆时间、反馈强度、回归时间等)，为近似计算提供向导。

(4) 研究耗散、记忆效应、反馈、回归的来源与机制。

(5) 研究系统–环境耦合动力学约化为主方程的条件与主方程的缺陷。

(6) 研究非 Markov 性的定义、度量、控制，其特征量，包括

平均场含时导致的非 Markov 性 (Markov 近似忽略了平均场，但考虑了关联场导致的耗散)；关联场互为因果性、记忆效应、纠缠交织效应导致的非 Markov 性如何描述?

现在关于非 Markov 性研究限于时间有关的耗散输运算子 (包括了关联场时间有关的耗散效应) 够吗? 高阶关联效应只修正耗散输运算子吗?

总之，基于约化密度矩阵的理论 (如主方程)，对描述系统–环境耦合是不完备的，需要补充新的物理量去描述关联场的纠缠交织效应。Markov 近似下的主方程丢失了关联, 导致关联方面的信息丧失。完整描述是系统–环境耦合动力学, 它可作为近似理论模型的参考标准。

近年, 有人开展超越 Markov 近似的研究, 用约化密度矩阵以外的新的物理量去描述 Markov 近似丢掉的关联信息，符合系统–环境耦合动力学的要求。

最后, 讨论系统–环境耦合动力学特征, 它与关联动力学的区别与联系。系统和环境相互作用，在系统和环境保持其各自的相对独立的个性条件下，形成一种特殊的耦合形式：环境对系统的塑造作用和系统对环境的反作用；对量子世界而言，量子背景选择量子系统的存在形式 (量子数), 从可能的存在形式中选择出几率最大的存在形式；量子背景与量子系统之间的相互作用，达到平衡时，以量子涨落和纠缠式的形式表现为弱耦合，因而能在对涨落平均之后保持各自的个性 (即相互作用只导致系统和环境之间的量子涨落与纠缠，并不破坏系统和环境各自的独立个性)。

系统–环境耦合动力学基于系统和环境的两个系统之间的相互作用与耦合。但系统–环境耦合动力学不同于多体关联动力学之处在于前者的系统和环境之间的相互作用导致的耦合较弱，因而能保持各自稳定的独立的个性；而后者的多体组元之间的耦合较强，各阶多体关联运动的相对独立性较弱，系统中不能形成个性较强的由多体关联维持的稳定独立的实体。

# 参 考 文 献


[1] Zurek, W H. Rev Mod Phys, 2003 75: 715–775.

[2] Maniscalco S, Petruccione F. Phys Rev, 2006, A73: 012111.

[3] Dulin F, Rotter D, Mukherjee M, et.al. Phys Rev Lett, 2007, 98: 183003.

[4] Koppens F H L, Klauser D, Coish W A, et al. Phys Rev Lett, 2007, 99:106803.

[5] Bellomo B, Lo Franco R, Compagno G. Phys Rev Lett, 2007, 99: 160502.

[6] Mogilevtsev D, Nisovtsev A P, Kilin S, et al. Phys Rev Lett, 2008, 100: 017401.

# 附录　一般参考书和习题的建议

## 附录一　一般参考书目


1. 曾谨言. 量子力学 II. 北京: 科学出版社，1993.
2. 喀兴林. 高等量子力学. 北京: 高等教育出版社，1999.
3. 余寿绵. 高等量子力学. 济南: 山东科学技术出版社，1985.
4. 杨泽森. 高等量子力学. 北京大学出版社，1995.
5. 倪光炯. 陈苏卿. 高等量子力学. 上海: 复旦大学出版社，2000.
6. 张启仁. 高等量子力学. 北京: 科学出版社, 2007.
7. Roman P. Advanced Quantum Mechanics. Addison-Wesley Publishing, 1965.
8. Dirac P A M. The Principle of Quantum Mechanics. New York: Oxford University Press, 1958;
   Dirac P A M. 量子力学原理. 北京: 科学出版社, 1965.
9. Feynman R P, Ribbs A. Quantum Mechanics and Path Integrals. New York: McGraw Hill, 1965.
10. Messiah A. Quantum Mechanics. I, II. Amsterdam: North Holland, 1962;
    Messiah(梅西亚)A. 量子力学. 二卷. 北京: 科学出版社, 1986.
11. Landau L D, Lifshitz M E. Quantum Mechanics, Non-relativistic Theory. London: Pergamon, 1977;
    朗道 L D, 栗弗席茨 M E. 量子力学 (非相对论理论). 北京：高等教育出版社, 1980, 1981.
12. Schiff L I. Quantum Mechanics. 3rd ed. New York: McGraw-Hill, 1967.
13. 张启仁. 量子力学. 北京: 科学出版社，2002.
14. 张永德. 量子力学. 北京: 科学出版社，2003.
15. 苏汝铿. 量子力学. 上海: 复旦大学出版社，1990.
16. 邹鹏程. 量子力学. 北京: 高等教育出版社，1989.
17. 费特, 瓦立克. 多粒子系统的量子理论. 北京: 科学出版社, 1987.
18. Wybourne B G. Classical Group for Physicists. New York: Wiley, 1974.
19. 顾莱纳 W, 缪勒 B. 量子力学：对称性. 北京: 北京大学出版社，2002.
20. 张礼，葛墨林. 量子力学的前沿问题. 北京: 清华大学出版社，2000.
21. 曾谨言. 量子力学前沿问题 1. 北京: 科学出版社，2000.

22. 曾谨言，龙桂鲁，裴寿镛. 量子力学新进展. 北京: 清华大学出版社，2003.
23. Bjorken J D, Drell S D. Relativistic Quantum Mechanics, Relativistic Quantum Fields. New York: McGraw-Hill, 1964–1965.
24. Itzykson C, Zuber J B. Quantum Field Theory I, II. New York: McGraw–Hill 1980.
25. Weinberg S. The Quantum Theory of fields. I, II, III. Cambrige: Cambridge University Press, 1995, 1996, 2000.
26. 钱伯初，曾谨言. 量子力学习题精选与剖析 (下册).2 版. 北京: 科学出版社，1999.
27. Fluegge S. Practical Quantum Mechanics. I, II. New York: Springer Verlag, 1974.
28. Goldstein H. Classical Mechanics. 2nd ed. Addison-Welsley Publishing, 1980.

## 附录二　关于第一篇简明量子多体理论的习题的建议

1. 补充完成各章节省略的公式推导。
2. 建议做下列书中各章所列出的习题:

钱伯初, 曾谨言. 量子力学习题精选与剖析书 (第二版), 下册, 北京: 科学出版社，1999.

Chapter 3: 1, 2, 5, 7, 9, 10, 11.

Chapter 4: 1, 2, 3, 5, 6, 7.

Chapter 5: 1, 2, 3, 8.

Chapter 6: 1, 3, 4, 5, 7, 8, 10, 11, 12.

Chapter 7: 1, 2, 3, 4, 25.

Chapter 9: 1, 2, 3, 4, 5.

Chapter 10: 1, 4, 5, 6.

# 《现代物理基础丛书》已出版书目

（按出版时间排序）

| | | |
|---|---|---|
| 1. 现代声学理论基础 | 马大猷 著 | 2004.03 |
| 2. 物理学家用微分几何 (第二版) | 侯伯元, 侯伯宇 著 | 2004.08 |
| 3. 数学物理方程及其近似方法 | 程建春 编著 | 2004.08 |
| 4. 计算物理学 | 马文淦 编著 | 2005.05 |
| 5. 相互作用的规范理论 (第二版) | 戴元本 著 | 2005.07 |
| 6. 理论力学 | 张建树, 等 编著 | 2005.08 |
| 7. 微分几何入门与广义相对论 (上册 · 第二版) | 梁灿彬, 周彬 著 | 2006.01 |
| 8. 物理学中的群论 (第二版) | 马中骐 著 | 2006.02 |
| 9. 辐射和光场的量子统计 | 曹昌祺 著 | 2006.03 |
| 10. 实验物理中的概率和统计 (第二版) | 朱永生 著 | 2006.04 |
| 11. 声学理论与工程应用 | 朱海潮, 等 编著 | 2006.05 |
| 12. 高等原子分子物理学 (第二版) | 徐克尊 著 | 2006.08 |
| 13. 大气声学 (第二版) | 杨训仁, 陈宇 著 | 2007.06 |
| 14. 输运理论 (第二版) | 黄祖洽 著 | 2008.01 |
| 15. 量子统计力学 (第二版) | 张先蔚 编著 | 2008.02 |
| 16. 凝聚态物理的格林函数理论 | 王怀玉 著 | 2008.05 |
| 17. 激光光散射谱学 | 张明生 著 | 2008.05 |
| 18. 量子非阿贝尔规范场论 | 曹昌祺 著 | 2008.07 |
| 19. 狭义相对论 (第二版) | 刘 辽, 等 编著 | 2008.07 |
| 20. 经典黑洞与量子黑洞 | 王永久 著 | 2008.08 |
| 21. 路径积分与量子物理导引 | 侯伯元, 等 著 | 2008.09 |
| 22. 量子光学导论 | 谭维翰 著 | 2009.01 |
| 23. 全息干涉计量——原理和方法 | 熊秉衡, 李俊昌 编著 | 2009.01 |
| 24. 实验数据多元统计分析 | 朱永生 编著 | 2009.02 |
| 25. 微分几何入门与广义相对论(中册 · 第二版) | 梁灿彬, 周彬 著 | 2009.03 |
| 26. 中子引发轻核反应的统计理论 | 张竞上 著 | 2009.03 |
| 27. 工程电磁理论 | 张善杰 著 | 2009.08 |
| 28. 微分几何入门与广义相对论(下册 · 第二版) | 梁灿彬, 周彬 著 | 2009.08 |
| 29. 经典电动力学 | 曹昌祺 著 | 2009.08 |

30. 经典宇宙和量子宇宙　王永久 著　2010.04
31. 高等结构动力学(第二版)　李东旭 著　2010.09
32. 粉末衍射法测定晶体结构(第二版 · 上、下册)　梁敬魁 编著　2011.03
33. 量子计算与量子信息原理　Giuliano Benenti 等 著
——第一卷：基本概念　王文阁, 李保文 译　2011.03
34. 近代晶体学(第二版)　张克从 著　2011.05
35. 引力理论(上、下册)　王永久 著　2011.06
36. 低温等离子体　B. M. 弗尔曼, И. M. 扎什京 编著
——等离子体的产生、工艺、问题及前景　邱励俭 译　2011.06
37. 量子物理新进展　梁九卿, 韦联福 著　2011.08
38. 电磁波理论　葛德彪, 魏 兵 著　2011.08
39. 激光光谱学　W. 戴姆特瑞德 著
——第 1 卷：基础理论　姬 扬 译　2012.02
40. 激光光谱学　W. 戴姆特瑞德 著
——第 2 卷：实验技术　姬 扬 译　2012.03
41. 量子光学导论(第二版)　谭维翰 著　2012.05
42. 中子衍射技术及其应用　姜传海, 杨传铮 编著　2012.06
43. 凝聚态、电磁学和引力中的多值场论　H. 克莱纳特 著
姜 颖 译　2012.06
44. 反常统计动力学导论　包景东 著　2012.06
45. 实验数据分析(上册)　朱永生 著　2012.06
46. 实验数据分析(下册)　朱永生 著　2012.06
47. 有机固体物理　解士杰, 等 著　2012.09
48. 磁性物理　金汉民 著　2013.01
49. 自旋电子学　翟宏如, 等 编著　2013.01
50. 同步辐射光源及其应用(上册)　麦振洪, 等 著　2013.03
51. 同步辐射光源及其应用(下册)　麦振洪, 等 著　2013.03
52. 高等量子力学　汪克林 著　2013.03
**53. 量子多体理论与运动模式动力学　王顺金 著　2013.03**
54. 薄膜生长（第二版）　吴自勤, 等 著　2013.03
55. 物理学中的数学物理方法　王怀玉 著　2013.03